ميكانيكا الكم

Quantum Mechanics

إعداد

د / إبراهيم بشري تمساح
كلية المعلمين بالرياض
قسم الفيزياء

د / أرباب إبراهيم أرباب
كلية المعلمين بالرياض
قسم الفيزياء



ميـــــكانيـــــكا الكـــــم

Quantum Mechanics

إعداد

د/ إبـراهيم بـشري تـمسام **أ.د/ أربـاب إبـراهيم أربـاب**

جامعة القصيم – المملكة العربية السعودية

مقدمة عن محتويات الكتاب

من دوافع إعداد هذا الكتاب هو عدم توفر المراجع والكتب الدراسية العربية التي تخدم علم ميكانيكا الكم كما وصفه العالم هايزنبرج. لقد لاحظنا أيضاً أن معظم الكتب العربية المتوفرة تتناول ميكانيكا الكم كما وصفها العالم شرودنجر في ما يُعرف بالوصف الموجي. من المتوقع أن القاري له إلمام جيد بميكانيكا الكم بصياغة شرودنجر قبل تصفح هذا الكتاب. ونتمني أن يجد طلاب السنوات النهائية الجامعية وطلاب الدراسات العليا هذا الكتاب ذا فائدة كبيرة في إعانتهم لفهم ميكانيكا الكم بطريقة جيدة. لقد أوردنا في هذا الكتاب العديد من الأمثلة لكي يتثني للطالب فهم هذه المادة واللإلمام بخفاياها.
يحتوي هذا الكتاب علي ستة فصول. يبدأ الكتاب بمقدمة عن ميكانيكا الكم كما صاغها شرودنجر وهايزنبرج بطريقتين متكافئتين. لقد صاغ هايزنبرج ميكانيكا الكم بدلالة المصفوفات ولذلك سنتناول في الفصل الأول مقدمة عن خصائص المتجهات والمؤثرات وكتابتها بدلالة المصفوفات. في هذا الوصف نجد أن دالة الحالة تُكتب علي صورة عمود ومرافقها علي صورة صف. أما المؤثرات فتكتب علي صورة مصفوفة. في الفصل الثاني ندرس أهم مثال لمنظومة كمية هي حركة المهتز التوافقي البسيط. في هذه الدراسة نتناول كيفية معالجة نظرية الكم لحركة المهتز التوافقي البسيط. ندرس في الفصل الثالث حركة الإلكترون الدائرية حول النواة. في هذه الحركة نعلم أن كمية الحركة الزاوية الكلية تكون محافظة. في هذا الفصل ندرس كيفية معالجة ميكانيكا الكم لكمية الحركة الزاوية للإلكترون وشروط التكمية لهذه الحركة. في الوقت نفسه نجد أن للإلكترون كمية حركة زاوية ترتبط بدوران الإلكترون حول نفسه (spin) ونري كيفية معالجة ميكانيكا الكم لها. نتناول في هذا الباب أيضاً كيفية جمع كميتي الحركة الزاوية للإلكترونات (الذرة).
يشتمل الفصل الرابع علي طرق التقريب لدراسة المنظومات المضطربة المستقلة عن الزمن. نري في هذا الباب كيف أن هذه الطرق نجحت في وصف

الظواهر الفيزيائية المرتبطة بهذا الإضطراب. نتناول الإضطراب المعتمد علي الزمن في الفصل الخامس حيث نتحدث عن بعض الظواهر الفيزيائية التي يؤثر فيها مثل هذا الاضطراب ومن أمثلتها الإنتقالات الذرية المستحثة. ونختم هذا الكتاب بالفصل السادس حيث نتناول طريقة تقريب WKB للحالات الفيزيائية الشبية بالمسائل الكلاسيكية.

نأمل أن نكون قد وفقنا في عرض هذه المادة الممتعة بطريقة سهلة ومفهومة للقاري العربي.

المؤلفان

المحتويات

مدخل:

لقد كان نشوء النظرية الكمية فى العقود الأولى من القرن العشرين ثورة كبيرة. وأصـبحت تُعـرف فيزيـاء مـا قبـل النظريـة الكميـة الآن بالنظريـة الكلاسـيكية. وتشمل هذه النظرية الكلاسيكية الميكانيكا النيوتونية ونظرية ماكسويل للموجـات الكهرومغنطيسية. ولقد كانتا هاتين النظريتين الدعامتين الأساسيتان للفيزياء حتى منتصف القرن التاسع عشر. وقد نجحتا بصورة رائعة فى تفسير العالم الطبيعي كما كان في ذلك الزمـان ، حتـى أن بعض الفيزيـائيين كـانوا يعتقدون بـان هـاتين النظـريتين كانتـا مـن حيـث المبدأ كافيتـان لتفسير جميـع الظـواهر الطبيعيـة فـى الكون. ولكن فى الواقع لم تكن هاتان النظريتان متسقتان مع بعضهما البعض من حيـث فروضـهما الأساسـية ممـا أدى الـى صـعوبة فـى فهـم ديناميكـا الأجسـام المشحونة كهربيا. وفـي الفترة من عـام **1905**م الـى **1916**م قدم آنشتين نظريـة النسبية الخاصـة التى أزالت عدم الاتسـاق بـين النظـريتين عبـر فهـم جديد للمكـان والزمان. وتعتبر هذه النظرية تتويج لأعظم إنجازات الفيزياء الكلاسيكية. ويبدو غريبا انه فى أثنـاء الفترة التى توج فيها آنشتين النظريـة النسبية تراكمت الأدلـة المعملية عن الظـواهر الذرية والتـي أدت الـى تقويض الأسس التـي بنيت عليهـا الفيزيـاء الكلاسيكية ، بـل أن آنشتين نفسـه هو الـذي لعـب دورا رياديـا فـى ذلـك واصـبح اسـمه اليـوم وآخـرين مثـل بلانـك وبـوهر ودبروقلـى وشـرود نقـر وهازينبرج هو الذي نذكره اليوم عند الحديث عن الثورة الكمية.

وفى محاولة لفهم الفيزيائيون طبيعة الذرة ومكوناتها الأساسية وكيفية تفاعلها مع الإشـعاع الكهرومغنطيسـى بـدءوا يتعرفـون علـى عجـز الفيزيـاء الكلاسيكية فـى تفسير ذلك. لقد كان بلانك وانشتين أول من ادخلوا مفاهيم الكم علـى أنهـا حـزم منفصلة من الطاقة تعرف بالفوتونـات. وقد كـان بـوهر أول من اقتـرح أنموذجـا كميـاً للـذرة رافضـا فيـه الوصـف الكهرومغنطيسـى الكلاسـيكية فـى أن الأجسـام المشحونة المتسـارعة تشع موجـات كهـر ومغنطيسية مستبدلا بـالأنموذج الكمـي (فوتـوني). حيث لا يحـدث إشـعاع للجسم إلا إذا انتقل مـن مـدار إلـى آخـر. كمـا سنرى ، أن هذا الأنمـوذج قد نجح فـى تفسير العديد من خطـوط الطيف الذريـة لذرة الهيـدروجين والـذرات المشـابهة لـه. وعلـى أيـة حـال ، لقد كـان هذا النجـاح محدودا بسبب انه مستمد من مزيج من أفكار كلاسيكية وأخرى كمية متعارضـة معهـا. وتـأخر ظهـور نظريـة كميـة تعتمـد (تعنـى) بالمفـاهيم الكميـة فحسـب قبـل

ظهور افتراض ثوري (جزري) جديد ومن ثم فهمه. لقد كان ذلك الافتراض هو الطبيعة الموجية للجسيمات التى قدمها العالم الفرنسي لويس دبروقلي والذي استخدمه شرود نقر لدراسة حركة الجسيمات فى معادلته المعروفة بمعادلة شرود نقر والتي تعتبر البديل الكمي لقانون نيوتن الثاني الكلاسيكي. وتوج العالم الإنجليزي ديراك تلك المجهودات بمزج ميكانيكا الكم مع النسبية الخاصة فيما يُعرف اليوم بنظرية الكم الكهروديناميكية، وتعتبر هذه النظرية أكثر النظريات نجاحا فى الوقت الحالي.

لقد نشأ وتقدم علم ميكانيكا الكم **Quantum Mechanics** كما نفهمه اليوم.

وتصاغ ميكانيكا الكم الحديثة بطريقتين متكافئين هما :

(1) الميكانيكا الموجية **Wave Mechanic** ولقد قدمها العالم **Schrodinger** وتعتمد على عمل العالم الفرنسي **Debroglie**.

(2) الميكانيكا المصفوفية **Matrix Mechanic** وتعزى للعالم **Heisenberg** رغم مشاركة العالمان **Born** و **Jordan** فى تقدمها. وسنقوم فى هذا الكتاب باستخدام الميكانيكا المصفوفية لمعالجة الظواهر الكمية المرتبطة بحركة الجسيمات. ونأمل أن يكون القارئ مُلماً بميكانيكا شرودنجر الموجية.

فرضيات ميكانيكا الكم

توصف الحالة العامة للمنظومة بالدالة $|\Psi(x,t)>$ حيث تحقق هذه الدالة معادلة شرودنجر

$$H|\Psi(x,t)>=E|\psi(x,t)>$$

حيث E هي الطاقة الكلية للمنظومة وهي مقدار ثابت. ونكتب الدالة $|\Psi(x,t)>$ علي الصورة

$$|\psi,t\rangle=\sum_n c_n(t)|n\rangle$$

لتصبح معادلة شرودنجر في الصورة

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi,t\rangle=\sum_n i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt}|n\rangle=\sum_n \hat{H}c_n(t)|n\rangle=\sum_n E_n c_n(t)|n\rangle$$

والتي نحصل منها علي

$$i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt}=E_n c_n(t)\quad\Longrightarrow\quad c_n(t)=e^{-iE_nt/\hbar}c_n(0)$$

لتصبح الدالة العامة في الصورة

$$|\psi,t\rangle = \sum_n e^{-iE_nt/\hbar} c_n(0)|n\rangle$$

ومنها نجد أن

$$\langle\psi,t| = \sum_n e^{iE_nt/\hbar} c_n(0)^*\langle n|$$

وبم أن الدالة $|\Psi(x,t)>$ دالة عيارية فإن

$$1 = \langle\psi,t|\psi,t\rangle = \sum_m\sum_n c_m^*(t)c_n(t)\langle m|n\rangle = \sum_n |c_n(t)|^2 = \sum_n |c_n(0)|^2$$

وفى بعض الأحيان نكتب $|\varphi_n> \equiv |n>$ للتبسيط.

ويمكـــن فصـــل الدالـــة $|\Psi(x,t)> = |\psi(t)>|\varphi(x)>$ علـــي الصـــورة $|\Psi(x,t)> = \sum_n c_n e^{-iEt/\hbar}|\varphi_n>$ وتُعرف الدوال الذاتية $|\varphi_n>$ الغير معتمدة على الزمن بالقواعد. وتحقق الدوال هذه الدوال الشرط

$$<\varphi_n|\varphi_m> = \delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

وتُكتب دالة الموجة المستقلة عن الزمن على الصورة

$$|\varphi(x)> = \sum_n c_n|\varphi_n>$$

وتحقق الثوابت c_n المعادلة $\sum_n |c_n|^2 = 1$ ويمثل $|c_1|^2$ إحتمال وجود الجسم في الحالة $|\varphi_1>$ و $|c_2|^2$ إحتمال وجود الجسم في الحالة $|\varphi_2>$ وهكذا.... وتُعرف القواعد $|\varphi_n>$ بأنها مكتملة إذا حققت الشرط $\sum_n |\varphi_n><\varphi_n| = 1$. ويُعرف الفضاء الذي تعمل فيه $|\varphi_n>$ بفضاء هلبرت.

تكون عناصر مصفوفة أي مؤثر $\hat{C}$ في القواعد $|\varphi_n>$ علي الصورة

$$C_{mn} = <\varphi_m|\hat{C}|\varphi_n>$$

حيث يُمثل $|\varphi_n>$ الصف و $<\varphi_m|$ العمود.

وتُكتب مصفوفة المؤثر C في القواعد $|\varphi_0>, |\varphi_1>, |\varphi_2>$ في الصورة العامة

$$\hat{C} = \begin{pmatrix} <\varphi_0|\hat{C}|\varphi_0> & <\varphi_0|\hat{C}|\varphi_1> & <\varphi_0|\hat{C}|\varphi_2> \\ <\varphi_1|\hat{C}|\varphi_0> & <\varphi_1|\hat{C}|\varphi_1> & <\varphi_1|\hat{C}|\varphi_2> \\ <\varphi_2|\hat{C}|\varphi_0> & <\varphi_2|\hat{C}|\varphi_1> & <\varphi_2|\hat{C}|\varphi_2> \end{pmatrix}$$

يُعرف المؤثران A و B بأنهما متوافقان إذا كان قوس التبادل لهما يساوي صفرا، أي $[A , B] = 0$ ويعنى هذا أن الدالة الذاتية لـ A و B مشتركة (واحدة). وفى ميكانيكا الكم نجد أن لكل مؤثر دالة ذاتية واحدة يتم فيها قياس الكمية الفيزيائية التي يمثلها المؤثر. ولا يجوز قياس كميتين لدالة ذاتية واحدة ما لم يكونا متوافقين. فعند تكرار عملية القياس تتغير النتيجة وذلك لقياس كمية فيزيائية ما نجري عددا كبيرا من التجارب ويُعطي متوسط أي كمية فيزيائية مؤثرها A بالمعادلة هو $< A >=< \varphi | \hat{A} | \varphi >$.

نجد أن قوس التبادل للمؤثرين A و B تحقق

$$[\hat{A} , \hat{B}^n] = n [\hat{A} , \hat{B}] \hat{B}^{n-1}$$

و

$$[\hat{A} , f(\hat{B})] = [\hat{A} , \hat{B}] f'(\hat{B})$$

إذا كان ناتج $[A , B]$ عددا. أما إذا كان ناتج $[A , B]$ مؤثرا آخر فإن

$$[\hat{A} , \hat{B}^n] = [\hat{A} , \hat{B}] \hat{B}^{n-1} + \hat{B} [\hat{A} , \hat{B}] \hat{B}^{n-2} + \hat{B}^2 [\hat{A} , \hat{B}] \hat{B}^{n-3} + ... + \hat{B}^{n-1} [\hat{A} , \hat{B}] \hat{B} + \hat{B}^{n-1} [\hat{A} , \hat{B}]$$

وكذلك

$$e^{\hat{B}} \hat{A} e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}] + \frac{1}{2}[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] + \ldots \quad .$$

وإذا كان $[A,[A , B]] = 0$ فإن

$$e^{\hat{B}} \hat{A} e^{-\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}]$$

فإذا كان $[A , B] = 0$ فإن $e^A e^B = e^{A+B}$.

ونجد أيضا أن

$$e^A B e^{-B} = e^{A+B+\frac{1}{2}[A, B]}$$

تُمثل كل الكميات الفيزيائية بمؤثرات هيرميتية وذلك لان قيمها الذاتية تكون حقيقية.

وتحقق الشرط $<A\varphi|\psi> = <\varphi|A\psi>$ وتعني أن $A = A^{+}$.
وفى وصف شرودنجر تكون دالة الموجة معتمدة على الزمن بينما يكون المؤثر غير ذلك. أما في وصف هايزنبرج المكّمل لشرودنجر يكون المؤثر متعمدا على الزمن بينما لا تعتمد دالة الموجة على الزمن. ومن معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن نجد أن

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$$

و

$$U(t,t_0) = e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$$

واختصاراً نكتب

$$|\psi_H\rangle = U^{\dagger}(t,t_0)\,|\psi(t)\rangle,$$
$$\hat{\Omega}_H(t) = U^{\dagger}(t,t_0)\,\hat{\Omega}\,U(t,t_0),$$

ويُعرف U بالمؤثر الأحادي ويحقق الشرط $UU^{+} = U^{+}U = 1$ (حيث يرمز الدليل H للدالة والمؤثر في وصف هايزنبرج). ويكون الإحتمال دائماً متساو في الوصفين، حيث يُعطي الإحتمال بـ

$$<\psi_H|\psi_H> = <\psi(t)|UU^{+}|\psi(t)> = <\psi(t)|\psi(t)> 1$$

بم أن المؤثر U أحادي. وتحكم المؤثر U المعادلة

$$i\,\hbar\,\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \hat{H}\,\hat{U}(t)$$

(1) القيم الذاتية للمؤثر الهيرميتة حقيقية

$$H\,|\,h\,\rangle = h\,|\,h\,\rangle$$

فإذا كان H مؤثر هيرميتي، أي $H = H^{+}$ فإن

$$\langle\,h'\,|\,H\,h\,\rangle = h\,\langle\,h'\,|\,h\,\rangle\,,$$
$$\langle\,h'\,|\,H^{\dagger}\,h\,\rangle = \langle\,H\,h'\,|\,h\,\rangle = h'^{*}\,\langle\,h'\,|\,h\,\rangle$$

$$(h - h'^{*})\,\langle\,h'\,|\,h\,\rangle = 0$$

وبوضع $h = h'$ نجد أن

$$(h - h^{*})\,\|h\| = 0$$

وبم أن $\|h\| \neq 0$ و $h = h^{*}$ فإن

$$(h-h')\langle h' | h \rangle = 0$$

وبالتالي إذا كان $h \neq h'$ فإن $<h'|h>=0$ أي متعامدة.

(2) القيم الذاتية للمؤثر الأحادي تساوي الوحدة

$$U | u \rangle = u | u \rangle$$

تحقق المؤثرات الأحادية (U) الشرط $UU^{+} = U^{+}U = 1$ وبالتالي

$$\langle u' | U^{\dagger}U\, u \rangle = \langle U\, u' | U\, u \rangle = u'^{*}u\, \langle u' | u \rangle = \langle u' | u \rangle$$

وبالتالي نحصل علي

$$(1-u'^{*}u)\langle u' | u \rangle = 0$$

فإذا كان

$$u' = u,\ (1-|u|^{2})\|u\| = 0$$

وعليه يجب أن يكون $|u|=1$.

(3) إذا كان $AB=1$ فإن A^{-1} و B^{-1} موجودان. نجد أن

$$\det[AB] = \det[A]\, \det[B] = \det[I] = 1$$

وبالتالي نلاحظ أن محددة A و محددة B لا يمكن أن تكون صفراً. وعليه فإن المعكوس يكون موجودا لكل من A و B.

(4) إذا كان $C = A + iB$ فإن $C^{+} = A - iB$. بفرض أن C مؤثر خطي نجد أن للدالتين $|\psi>$ و $|\varphi>$ يُعطي المؤثر C^{+} بالمعادلة

$$\begin{aligned}\langle \psi | C^{\dagger}\phi \rangle &= \langle C\psi | \phi \rangle = [\langle \phi | C\psi \rangle]^{*} = [\langle \phi | (A+iB)\psi \rangle]^{*} \\ &= [\langle \phi | A\psi \rangle]^{*} - i\,[\langle \phi | B\psi \rangle]^{*} = \langle A\psi | \phi \rangle - i\,\langle B\psi | \phi \rangle \\ &= \langle \psi | A^{\dagger}\phi \rangle - i\,\langle \psi | B^{\dagger}\phi \rangle = \langle \psi | (A^{\dagger} - i\,B)\,\phi \rangle\,.\end{aligned}$$

وبالتالي يكون $C^{+} = A^{+} - iB^{+}$ كما هو متوقع.

(5) يمكن كتابة أي مؤثر C في الصورة $C = A + iB$ حيث A و B مؤثران هيرميتيان. أولاً يمكن أن نكتب C علي الصورة

$$C = \frac{1}{2}[C + C^{\dagger}] + \frac{1}{2}[C - C^{\dagger}] \equiv A + iB$$

حيث

$$A = \frac{1}{2}\,[C + C^{\dagger}]\,, \qquad B = \frac{1}{2i}\,[C - C^{\dagger}]$$

ومن الواضح جدا أن $A = A^{+}$ و $B = B^{+}$ ويكمل هذا الإثبات.

(6) من معادلة شرودنجر نجد أن

$$\hat{H}\,|\,\Psi(t)\,\rangle = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\,\Psi(t)\,\rangle$$

ويكتب متوسط $\hat{A}$ ، حيث لا يعتمد $\hat{A}$ علي الزمن مباشرة، علي الصورة

$$\langle\,\hat{A}(t)\,\rangle = \langle\,\Psi(t)\,|\,\hat{A}\,|\,\Psi(t)\,\rangle$$

ومنها يكون

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\,\hat{A}(t)\,\rangle = \langle\,\Psi(t)\,|\,[\,\hat{A}, H\,]\,|\,\Psi(t)\,\rangle/(i\hbar)$$

أو

$$\begin{aligned}
\partial_t\langle\,\hat{A}(t)\,\rangle &= \langle\,\partial_t\Psi(t)\,|\,\hat{A}\,|\,\Psi(t)\,\rangle + \langle\,\Psi(t)\,|\,\hat{A}\,|\,\partial_t\Psi(t)\,\rangle \\
&= \{\,\langle\,\hat{H}\Psi(t)\,|\hat{A}\,|\,\Psi(t)\,\rangle - \langle\,\Psi(t)\,|\,\hat{A}\,|\,\hat{H}\Psi(t)\,\rangle\,\}/(i\hbar) \\
&= \{\,\langle\,\Psi(t)\,|\,(\,\hat{H}\,\hat{A} - \hat{A}\,\hat{H}\,)\,|\,\Psi(t)\,\rangle\,\}/(i\hbar) \\
&= \langle\,\Psi(t)\,|\,[\,\hat{A}, \hat{H}\,]\,|\,\Psi(t)\,\rangle/(i\hbar)\,,
\end{aligned}$$

حيث نعلم أن H مؤثر هيرميتي.

الفصل الأول
التمثيل الإتجاهي و المصفوفي لميكانيكا الكم

1.1 فضاء المتجهات الخطية (Linear Vector Space)

فضاء المتجه الخطى هو مجموعة المتجهات ($V_1, V_2, V_3, V_4, \dots$) التى يمكن جمعها وضربها بالأعداد، بحيث أن عمليات الجمع والضرب تعطى عناصر داخل المجموعة أعلاه (إغلاق)، وان الجمع والضرب فى أعداد يحقق الشروط التالية:

- (التبادل) $V_i + V_j = V_j + V_i$
- (التجميع) $(V_i + (V_j + V_k) = (V_i + V_j) + V_k$ لأي متجه V_i, V_j, V_k
- العنصر المحايد $V_i + 0 = V_i$
- (المعكوس) $V_i + (-V_i) = 0$
- $\alpha(V_i + V_j) = \alpha V_j + \alpha V_i$
- $(\alpha + \beta)V_i = \alpha V_i + \beta V_i$
- $(\alpha(\beta V)_i = (\alpha\beta)V_i$

قدم العالم ديراك في ميكانيكا الكم ترميزاً لهذه المتجهات بحيث يمثل المتجه V_i بـ $|V_i>$ ومرافقه V_i^* بـ $<V_i|$.

1.2 فضاء الضرب الداخلي (Inner-Product)

هذا الضرب تعميم للضرب القياسي للمتجهات الحقيقية في ثلاثة أبعاد ($\vec{A} \cdot \vec{B}$)، وهو عبارة عن دالة قياسية (Scalar Function). ويحقق ضرب متجهين $|V_i>$،$|V_j>$ الشروط التالية:

- $<V_i | V_i> \ \geq 0$
- $<V_i | V_j> = <V_j | V_i>^*$

- $< V_i | \alpha V_j + \beta V_k >= \alpha < V_i | V_j > + \beta < V_i | V_k >$
- $< \alpha V_i + \beta V_j | V_k >= \alpha^* < V_i | V_k > + \beta^* < V_i | V_k >$

ويُمثل $<V|V'>$ قوساً (Bracket). ويُعرف الجزء $< V |$ بالـ Bra والجزء $| V >$ بالـ Ket.

ويعّرف طول المتجه (norm) بـ $|V_i| = \left(\langle V_i | V_i \rangle\right)^{\frac{1}{2}}$. ويُقال بأن المتجه مُعّاير (normalized) إذا كان طوله (norm) يساوى الوحدة.

إذا كان المتجه

$$|V >= \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \qquad (1.1)$$

فان المتجه المُعّاير له يكون

$$|V >= \frac{1}{\sqrt{|a|^2 + |b|^2 + |c|^2}} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \qquad (1.2)$$

وإذا كان حاصل ضرب متجهين صفراً، يقال بأن المتجهين متعامدين (orthogonal). ويُقال لمجموعة المتجهات $(e_1, e_2, \cdots)$ بأنها orthonormal إذا كانت تحقق الشرط

$$< e_i | e_j >= \delta_{ij} \qquad (1.3)$$

حيث أن

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \qquad (1.4)$$

وتُعرف δ_{ij} بدلتا كرونكر (Kronecker).

أما إذا كانت القواعد غير متعامدة، أي $< e_i | e_j >= g_{ij} \neq \delta_{ij}$، فإننا نُعّرف قواعد أخرى علي الصورة $|e^i >$، حيث $i = 1,2,3,\cdots$، تكون متعامدة على القواعد القديمة $|e_i >$ وبالتالي يكون

$$< e^i | e_j >=< e_i | e^j >= \delta_{ij}$$

وكذلك

$$\sum_i | e_i >< e^i | = \sum_i | e^i >< e_i | = 1 \qquad (1.5)$$

نلاحظ أن المتجهات $| e^i >$ غير متعامدة مع بعضها البعض وليست مُعّايرة.
ونجد أن

$$\sum_i g_{ij} g^{jk} =< e_i | e^k >= \delta_{ik}$$

حيث g^{ij} هي مقلوب مصفوفة g_{ij}. نجد أن

$$| e^j >= \sum_i g^{ij} | e_i > \qquad \text{و} \qquad | e_j >= \sum_i g_{ij} | e^i >$$

ويمكن كتابة أي متجه بدلالة قواعد متعامدة ومُعّايرة (Orthonormal basis) في الصورة

$$| V >= \sum_{i=1}^n \text{v}_i e_i \qquad (1.6)$$

أو

$$| V >= \sum_{i=1}^n \text{v}_i | e_i >= \text{v}_1 | e_1 > + \text{v}_2 | e_2 > + \text{v}_3 | e_3 > + ... \qquad (1.7)$$

حيث أن e_i ($| e_i >$) هى قواعد المتجه و v_i هى مركباته. وفى ثلاثة أبعاد يمكن كتابة

$$| e_1 >= i, \quad | e_2 >= j, \quad | e_3 >= k, \quad \text{v}_1 = \text{v}_x, \quad \text{v}_2 = \text{v}_y, \quad \text{v}_3 = \text{v}_z$$

تُمّثل مركبات المتجه $| \text{V} >$ في صورة عمود على النحو التالي

$$| V >= \begin{pmatrix} \text{v}_1 \\ \text{v}_2 \\ \text{v}_3 \\ \text{v}_4 \\ ... \end{pmatrix} \qquad (1.8)$$

أما المتجه $< \text{V} |$ هو المرافق لـ $| V >$ وتُمّثل مركباته بصف على النحو التالي

$$< \text{V} |= (\text{v}_1{}^*, \text{v}_2{}^*, \text{v}_3{}^*, \text{v}_4{}^*, ...)$$

ونحصل عليه بتحويل كل عمود إلي صف مع أخذ المرافق لكل عنصر. تُعرف هذه العملية بـ Adjoint، أي

$$< V |= (| V >)^*$$

ومنها نجد أن

$$< V | V >= \left(v_1^*, v_2^*, v_3^*, v_4^*, ...\right) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ ... \end{pmatrix}$$

التي تُعطي المقدار

$$< V | V >= v_1^* v_1 + v_2^* v_2 + v_3^* v_3 + v_4^* v_4 + ..$$

ويكُتب الضرب أعلاه في صورة المجموع

$$< V | V >= \sum_{i=1}^{n} v_i^* v_i = \sum_{i=1}^{n} | v_i |^2$$

حيث n هو بُعد (dimension) المتجه. تُمثل القواعد $| e_i >$ بـالعمود

$$| e_i >= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1^{ith} \\ 0 \\ .. \end{pmatrix} =| i >$$

حيث نجد أن العدد واحد يكون عند الحد رقم i في ترتيب العناصـر. يمكن كتابـة المعادلة (1.6) في الصورة

$$| V >= \sum_{i=1}^{n} v_i | i > \qquad (1.9)$$

و الـمرافق لها في الصورة

$$< V |= \sum_{i=1}^{n} v_i^* < i |$$

وفي كثير من الحالات تحذف علامة الـ $\sum$ من التعريف، و تُكتب المتجهات أعلاه في الصورة

$$< V |= \mathrm{v}_i^* < i | \qquad \text{و} \qquad | \mathrm{V} >= \mathrm{v}_i \; | \mathrm{i} >$$

ويُعرف هذا الوضع باصطلاح آنشتين (Einstein convention).
وبضرب طرفى المعادلة أعلاه فى $< j |$ من جهة اليسار نحصل على

$$< j | V >= \mathrm{v}_i < j | i >= \mathrm{v}_i \delta_{ij} = \mathrm{v}_j$$

(راجع خواص δ_{ij}) وتُعرف $< j | V >$ بإسقاط (مركبة) المتجه (projection) فى إتجاه $| j >$.
ونعّرف مؤثر الإسقاط (projection operator) بـالمعادلة

$$\mathrm{P}_i =| \mathrm{i} >< \mathrm{i} |$$

ومنها نجد أن

$$\sum_i P_i = \sum_i | i >< i | = 1$$

ونقول بان القواعد $| i >$ مكتملة (complete).
ونلاحظ أن:

$$\mathrm{P}_i \,| \mathrm{V} >= \sum_i | \mathrm{i} >< \mathrm{i} | \mathrm{V} >= \sum_i | \mathrm{i} >< \mathrm{i} | \sum_j \mathrm{v}_j \,| \mathrm{j} >$$

$$\mathrm{P}_i \,| \mathrm{V} >= \sum_i \sum_j \mathrm{v}_j \,| \mathrm{i} >< \mathrm{i} | \mathrm{j} > = \sum_i \mathrm{v}_j \,| \mathrm{i} > \delta_{ij} = \mathrm{v}_i \,| i > \qquad (1.10)$$

أي أن P_i أختار المركبة في إتجاه $| i >$ من بين مركبات المتجه $| \mathrm{V} >$ المختلفة.
ولذاك يُعرف هذا بالمُسقِط (projection operator). ويمكن كتابة المتجه

$$| \psi >= c_i \,| i >$$

في الصورة

$$| \psi >=< i | \psi > | i > \qquad (1.11)$$

حيث نجد أن

$$< j | \psi >= c_i < j | i >= c_i \delta_{ij} = c_j$$

أو $< j | \psi >= c_j$ (أو $< i | \psi >= c_i$) وذلك بضرب المعادلة أعلاه من جهة اليمين في $< j |$.

مثال (1):

أكتب المتجه $\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$ بدلالة القواعد $|e_1>$ و $|e_2>$ و $|e_3>$ حيث

$$|e_1>=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} \text{ و } |e_2>=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \text{ و } |e_3>=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

الحل

أولا يمكن كتابة المتجه $\vec{r}$ في الصورة (بوضع $i=|e_1>$ و $j=|e_2>$ و $k=|e_3>$)

$$\vec{r} = \mathrm{x}\,|e_1>+\mathrm{y}\,|e_2>+\mathrm{z}\,|e_3>$$

وبالتعويض عن $|e_1>$ و $|e_2$ و $|e_3>$ نحصل علي

$$\vec{r} = x\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}+y\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}+z\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

أو

$$|r>=\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

ويمكننا بالتالي كتابة المتجه $|\chi>=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$ علي الصورة

$$|\chi>=a\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}+b\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}+c\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}=a\,|1>+b\,|2>+c\,|3>$$

حيـث $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $|3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ همـا القاعـدتان الأساسـيتان للمتجـه (وهي نفس القواعد السابقة $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$).

مثال (2):

إذا كانت $|\psi_1\rangle = 5|1\rangle - 3|2\rangle + 2|3\rangle$ و $|\psi_2\rangle = |1\rangle - 5|2\rangle + x|3\rangle$. أوجد قيمة x التي تجعل الدالتين متعامدين.

الحل

من شرط التعامد $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$ نحصل علي

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = (5\langle 1| - 3\langle 2| + 2\langle 3|)(1|1\rangle - 5|2\rangle + x|3\rangle)$$

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 5 + 15 + 2x = 0$$

ومنها نجد أن $x = -10$، حيث

$\langle 2|1\rangle = \langle 1|3\rangle = \langle 2|3\rangle = 0$ و $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = \langle 3|3\rangle = 1$.

مثال (3):

إذا كـــــــــان $|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$ فـــــــــإن $\langle e_1| = (1 \quad 0)$ و $\langle e_2| = \frac{1}{\sqrt{2}}(-i \quad 1)$، أجد القواعد المتعامدة علي هذه القواعد.

الحل

نجد أن مصفوفة التحويل

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{pmatrix}$$

والتي يُمكن كتابتها في الصورة

$$g_{ij}=\begin{pmatrix} <e_1|e_1> & <e_1|e_2> \\ <e_2|e_1> & <e_2|e_2> \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{-i}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}$$

حيث

$$<e_k|e_j>=\sum_i <e_k|g_{ij}e^i>=\sum_i g_{ij}\ <e_k|e^i>=\sum_i g_{ij}\delta_{ik}=g_{kj}$$

أي

$$.<e_k|e_j>=g_{kj}$$

ويكون مقلوب g_{ij} هو

$$g^{ij}=\begin{pmatrix} 2 & -i\sqrt{2} \\ i\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}$$

ومن المعادلة $|e^j>=\sum_i g^{ij}|e_i>$ نجد أن (بوضع $j=1$)

$$|e^1>=\sum_i g^{i1}|e_i>=g^{11}|e_1>+g^{21}|e_2>$$

وبالتعويض نجد أن

$$|e^1>=2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+i\sqrt{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$$

ومن المعادلة $|e^j>=\sum_i g^{ij}|e_i>$ نجد أن (بوضع $j=2$)

$$|e^2>=\sum_i g^{i2}|e_i>=g^{12}|e_1>+g^{22}|e_2>$$

وبالتعويض نجد أن

$$|e^2>=-i\sqrt{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

ونجد الآن أن المتجهين $|e^1>,|e^2>$ متعامدان علـي $|e_1>,|e_2>$ وذلك حسب العلاقة $.<e^i|e_j>=<e_i|e^j>=\delta_{ij}$

1.3 المؤثر الخطى (Linear Operator)

يعمل المؤثر عموماً على تحويل متجه إلي متجه آخر. ويُمثل عمل المؤثر Ω علي المتجه $|V>$ بالمعادلة

$$\Omega|V>=|V'> \qquad (1.12)$$

وعليه يقال بأن المؤثر Ω عمل على تحويل المتجه$|V>$ إلي المتجه $|V'>$.
ويجب أن يكون هذه المتجه الجديد$|V'>$ ضمن متجهات الفضاء في المسألة.
ويحقق المؤثر الخطى العلاقات التالية:

$$\begin{aligned}&\Omega\,\alpha|V>=\alpha\,\Omega|V>\\&\Omega\big(\alpha|V_i>+\beta|V_j>\big)=\alpha\,\Omega|V_i>+\beta\,\Omega|V_j>\\&\big(<V_i|\alpha+<V_j|\beta\big)\Omega=\alpha<V_i|\Omega+\beta<V_j|\Omega\end{aligned} \qquad (1.13)$$

وهنالك مؤثر الوحدة I ويعمل على الصورة

- $|V>=|V>I$
- $<V|I=<V|$

فعندما يعمل المؤثر على متجه ما فإنه يغّير قواعده ومركباته، علي النحو

$$\Omega|V>=\Omega\,\mathrm{v}_i\,|i>=\mathrm{v}_i\Omega|i>=\mathrm{v}_i\,|i'>\equiv|V'> \qquad (1.14)$$

حيث

$$|V>=\mathrm{v}_i\,|i> \qquad (1.14a)$$

و

$$\Omega|i>=|i'>$$

و

$$|V'>=\mathrm{v}_i\,|i'> \qquad (1.14b)$$

نجد في ميكانيكا الكم أن جميع الكميات الفيزيائية لها مؤثر رياضي. وتمثل حالة الجسيم بمتجه. ويتم قياس الكمية الفيزيائية بتأثير هذا المؤثر علي حالة الجسيم. ويجب الا يغير المؤثر حالة الجسيم بعد عملية القياس.

1.4 عناصر مصفوفة المؤثرات

نـود هنـا أن نوجـد العلاقـة بـين القواعـد الجديـدة $|i'>$ للمتجـه الجديـد $|V'>$ مـع القواعد القديمة $|i>$. نعلم مما سبق أن (1.15) $\Omega|i>=|i'>$

بضـرب طرفـي المعادلـة (1.15) مـن جهـة اليسـار فـي $<j|$ نحصـل علـى

$$<j|\Omega|i>=<j|i'> \qquad (1.16)$$

وبكتابة

$$\Omega_{ij} \equiv <j|\Omega|i> \qquad (1.16a)$$

تصـبح Ω_{ij} عبـارة عـن مصـفوفة يُمثـل فيهـا $j,\ i$ رتبـة الصـف والعمـود علـي الترتيب.

ولكن من المعادلة (1.14) نجد أن

$$\Omega|\mathrm{V}>=|\mathrm{V}'>$$

وبضرب المعادلة أعلاه من اليسار في $<i|$ نجد أن

$$<i|\Omega|V>=<i|V'>$$

$$<i|\Omega \mathrm{v}_j|j>=\mathrm{v}_j<i|\Omega|j> \qquad (1.16b)$$

$$<i|\Omega|V>=\mathrm{v}_j\Omega_{ij}$$

أي

$$\mathrm{v}'_i=\Omega_{ij}\mathrm{v}_j \qquad (1.16c)$$

حيث $\mathrm{v}'_i=<i|V'>$ ويمكن كتابة المعادلة أعلاه في صورة مصفوفة علي النحو التالي (حيث $|i>,|j>=1,2,3$)

$$\begin{pmatrix} \mathrm{v}'_1 \\ \mathrm{v}'_2 \\ \mathrm{v}'_3 \\ \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} <1|\Omega|1> & <1|\Omega|2> & <1|\Omega|3> & \cdots \\ <2|\Omega|1> & <2|\Omega|2> & <2|\Omega|3> & \cdots \\ <3|\Omega|1> & <3|\Omega|2> & <3|\Omega|3> & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{v}_1 \\ \mathrm{v}_2 \\ \mathrm{v}_3 \\ \cdots \end{pmatrix} \qquad (1.16d)$$

أو

$$\begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ \ldots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_{11} & \Omega_{12} & \Omega_{13} & \ldots \\ \Omega_{21} & \Omega_{22} & \Omega_{23} & \ldots \\ \Omega_{31} & \Omega_{32} & \Omega_{33} & \ldots \\ \ldots & & \ldots\ldots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \ldots \end{pmatrix}$$

حيث $\Omega_{ij} =< i\,|\,\Omega\,|\,j >$. نلاحظ أن مركبات المتجه الجديدة تعتمد على المركبات القديمة بالإضافة إلى عناصر المصفوفة المكونة من القواعد القديمة (Ω_{ij}).

ولقد قدم العالم هايزنبرج صياغة أخري لميكانيكا الكم وذلك بتمثيل دالـة الموجـة بعمود والمؤثر بمصفوفة، كما يتضح لنا هذا التمثيل لاحقاً.

مثال (1):

ما هو المتجه $|V'>$ التى ينتج من تأثير المؤثر $\Omega = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ على المتجه $|V>$ ؟ ومن ثم أوجد مصفوفة المسقط P_1 و P_2.

الحل

أولاً: إذا كانت قواعد المتجه $|V>$ هى $|1>$ و $|2>$ والذي يمكن تمثيله بـ

$$|1> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

فـإن مركبـات وقواعـد المتجـه الجديـدة $|V'>$ يمكـن معرفتهـا مـن المعـادلتين (1.15) و (1.16c).

يمكن كتابة المتجـه $|V>$ فـى صـورة $|V> = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$. ومـن المعادلـة (1.16d) نجد أن

$$\begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} <1|\Omega|1> & <1|\Omega|2> \\ <2|\Omega|1> & <2|\Omega|2> \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

و الآن فإن

$$\Omega_{11} =<1|\Omega|1>= \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = 1\,,$$

$$\Omega_{12} =<1|\Omega|2>= \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} = -1$$

$$\Omega_{21} =<2|\Omega|1>= \begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = 0\,,$$

$$\Omega_{22} =<2|\Omega|2>= \begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} = 1$$

ويصبح المتجه الجديد $|V'>$ علي الصورة

$$\begin{pmatrix}v'_1\\ v'_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_1\\ v_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}v_1 - v_2\\ v_2\end{pmatrix}$$

أي

$$v'_1 = v_1 - v_2\ ,\ v'_2 = v_2$$

ولإيجاد المركبات الجديدة نستخدم المعادلة

$$|i'>=\Omega|i>$$

$$|1'>=\Omega|1>, \qquad |2'>=\Omega|2>$$

إذاً

$$|1'>= \begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}, \quad |2'>= \begin{pmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1\\ 1\end{pmatrix}$$

وعليه فإن

$$|1'>= \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}, \quad |2'>= \begin{pmatrix}-1\\ 1\end{pmatrix}$$

ومنها يكون المتجه $|V'>$ علي الصورة

$$|V'>= v'_1\,|1'> + v'_2\,|2'>= \begin{pmatrix}v_1 - v_2\\ v_2\end{pmatrix}$$

وفى القواعد $|1>$ و $|2>$ يكون متجه الإسقاط علي الصورة

$$P_1 = |1><1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

و

$$P_2 = |2><2| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

والآن نجد أن مسقط $|V>$ في الإتجاه $|1>$ هو

$$P_1 |V> = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = v_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = v_1 |1>$$

وكذلك مسقط $|V>$ في الإتجاه $|2>$ هو

$$P_2 |V> = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = v_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = v_2 |2>$$

لقد ذكرنا في ما سبق أن القواعد المختلفة تكون متعامدة والمتساوية تكون مُعّايرة، وكتبنا ذلك في الصورة

$$<i|j> = \delta_{i,j}$$

نلاحظ أن القواعد $|2'>$, $|1'>$ لا تحقق شرطي التعامد والمُعّايرة. وللحصول علي قواعد تحقق هذين الشرطين نستخدم قاعدة جرام - شمت (**Gram-Schmidt**) وذلك بوضع القواعد الجديدة ($|m>$) علي النحو التالي:

$$|m_1> = |i>$$

$$|m_2> = |j> - \frac{<j|m_1>}{|m_1|^2} |m_1>$$

$$|m_3> = |k> - \frac{<k|m_1>}{|m_1|^2} |m_1> - \frac{<k|m_2>}{|m_2|^2} |m_2>$$

وتكون في هذه الحالة القواعد $|m_1>$ و $|m_2>$ و $|m_3>$ متعامدة حتى أن لم تكن $|i>$ و $|j>$ و $|k>$ متعامدة. نلاحظ أن القواعد $|1'>$ و $|2'>$ غير متعامدة

ولتكوين قواعد متعامدة منها نستخدم قاعدة جرام- شمت بأخذ $|i>=|1'>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ و $|j>=|2'>=\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}$ في المثال أعلاه لنحصل علي

$$|m_1>=|1'>$$

و $$|m_2>=|2'>-\frac{<2'|1'>}{<1'|1'>}|1'>=|2'>-\frac{-1}{<1'|1'>}|1'>=|2'>+|1'>$$

والآن نجد أن $<m_1|m_1>=<m_2|m_2>=1$ و $<m_1|m_2>=<m_2|m_1>=0$. إذا $|m_1>$ و $|m_2>$ قواعد متعامدة.

تمرين:

أثبت أن للقواعد المُعّايرة والمتعامدة $|e_1>$ و $|e_2>$ و $|e_3>$ يكون $\sum_{i=1}|e_i><e_i|=1$.

فضاء هلبرت ودوال الموجة

نجد أن الفضاء الذي يهمنا في ميكانيكا الكم هو فضـاء هلبرت والـذي يكون فيـه تكامل مربع القيمة المطلقة للدوال موجوداً في ذلك الفضاء. في بُعد واحد نجد أن $\int|\psi(x)|^2\ dx<\infty$. وهذا الفضاء هو فضاء متجهي له بُعد لانهائي بحيث يكون

$$<\phi|\psi>=\int\phi^*(x)\psi(x)\,dx$$

توجد قواعد مُعّايرة ومتعامدة لانهائية علي الصورة $\{u_n(x)\}$ ، أي

$$\int u_n^*(x)u_n(x)\,dx=\delta_{n,m}$$

ويمكن كتابة أي دالة $(\psi(x))$ في هذا الفضاء علي الصورة

$$\psi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n u_n(x)$$

حيث

$$c_n=\int u_n^*(x)\psi(x)\,dx$$

بوضع $\psi(x)\equiv|\psi>$ كمتجه في فضاء هلبرت تكون

$$|\psi>=\sum_n|u_n><u_n|\psi>$$

حيث $<u_n|\psi>=c_n$ متجه عمودي بُعده لانهائي. يعمل المؤثر $\hat{A}$ علي المتجه $|\psi>$ علي الصورة $\hat{A}|\psi>=|\phi>$. بضرب طرفي هذه المعادلة من جهة اليسار في $<u_n|$ ثم إستخدام علاقة الإكتمال للقواعد $|u_n>$ نعلم أن $\sum_m |u_m><u_m|=1$.

والآن تصبح المعادلة $\hat{A}|\psi>=|\phi>$ في الصورة

$$\sum_m <u_n|\hat{A}|u_m><u_m|\psi>=<u_n|\phi>$$

وهي معادلة مصفوفية لانهائية علي الصورة A_{nm}. في الواقع نهتم فقط في وصف المصفوفات التي لها بُعد محدد في دراستنا لميكانيكا الكم كما سنري لاحقاً أن شاء الله.

التمثيل للكميات المستمرة

نجد أن بعض المؤثرات لها قيم ذاتية متصلة مثل مؤثري الموقع وكمية الحركة حيث تكون قيمها الذاتية $-\infty<x<\infty$ و $-\infty<p<\infty$ علي الترتيب. ونجد أن هذه القيم لا تقع في فضاء هلبرت، ولكن تقع في الفضاء الثنائي له (dual space) والتي يمكن إستخدامها لإيجاد تمثيل هذه المؤثرات.

إذا كان $\psi(x)=<x|\psi>$ هو تمثيل للدالة بواسطة الموقع x فإن تمثيل الدالة بدلالة كمية الحركة p هي $\tilde{\psi}(p)=<p|\psi>$. تصبح علاقتي إكتمال القواعد $|x>$ و $|p>$ علي النحو التالي

$$\int_{-\infty}^{\infty}|x><x|\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}|p><p|\,dp=1$$

وبإدخال هاتين العلاقتين يمكن كتابة الآتي:

$$<\phi|\psi>=\int_{-\infty}^{\infty}<\phi|x><x|\psi>dx=\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(x)\psi(x)\,dx$$

$$<\phi|\psi>=\int_{-\infty}^{\infty}<\phi|p><p|\psi>dp=\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\phi}^*(p)\tilde{\psi}(p)\,dx$$

حيث

$$|\psi>=\int_{-\infty}^{\infty}|x><x|\psi>dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)|x>dx$$

$$\widetilde{\psi}(p) = < p|\psi > = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) < p|x > dx$$

مع العلم بأن $< p|x > = < x|p > ^* = u_p^*(x)$.

فإذا كان

$$< x|p > = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(\tfrac{i}{\hbar} p\, x)$$

فإن

$$u_p^*(p) = < x|p > ^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-\tfrac{i}{\hbar} p\, x)$$

ومن ثم تكون

$$\widetilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-\tfrac{i}{\hbar} p\, x) \psi(x)$$

وتُمّثل عملية تحويل للقواعد، أي كتابة الدالة بقواعد كمية الحركة بدلاً عن قواعد الموقع. ويُعرف هذا التحويل بتحويل فوريه (**Fourier Transform**).

نجد في القواعد المتصلة $\{|x>\}$ و $\{|p>\}$ أن المؤثرات لا يمكن تمثيلها بدلالة المصفوفات ولكن بدلالة مؤثرات تفاضلية. فعلي سبيل المثال خذ تأثير مؤثر الموقع وكمية الحركة علي الدالة $|\psi>$، أي $\hat{x}|\psi>$ و $\hat{p}|\psi>$. ففي تمثيل الموقع نكتب

$$< x|\hat{x}|\psi > = x < x|\psi > = x\psi(x)$$

و

$$< x|\hat{p}|\psi > = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} < x|\psi > = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

وفي تمثيل الموقع نجد أن

$$< p|\hat{x}|\psi > = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p} < p|\psi > = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \widetilde{\psi}}{\partial p}$$

و

$$< p|\hat{p}|\psi > = p < p|\psi > = p\widetilde{\psi}(p)$$

وتكون عناصر المصفوفة في تمثيل الموقع للمؤثرات علي الصورة

$$<\phi|\hat{A}|\psi>=\int\phi^*(x)\left(\hat{A}\psi(x)\right)dx$$

وبم أن المؤثر $\hat{A}$ يعمل علي $|\phi>$ في الصورة كالمؤثر $\hat{A}^+$ فإن

$$<\phi|\hat{A}|\psi>=\int\left(\hat{A}^+\phi\right)^*\psi(x)\,dx$$

وبهذه الطريقة يُعّرف المؤثر بأنه مؤثر هيرميتي إذا تحقق الشرط

$$\int\phi^*(x)\left(\hat{A}\psi(x)\right)dx=\int\left(\hat{A}\phi\right)^*\psi(x)\,dx$$

1.5 معادلة القيمة الذاتية (The Eigen Value Problem)

إذا كانت نتيجة عمل المؤثر Ω على المتجه $|V>$ هو

$$\Omega|V>=\omega|V> \qquad (1.17)$$

حيث ω عدد (مركب)، يطلق على المعادلة أعلاه معادلة القيمة الذاتية. وفى هذه الحالة نقول بأن المتجه $|V>$ عبارة عن دالة ذاتية (Eigen function) للمؤثر Ω. من المعادلة (1.17) نجد أن

$$(\Omega-\omega I)|V>=0 \qquad (1.18)$$

ويكمن حلها في أن $|V>\neq 0$ ، وهذا يعنى أن محددة المقدار

$$|\Omega-\omega I|=0$$

بضرب المعادلة (1.18) في $|i>$ من جهة اليسار نحصل على

$$<i|\Omega-\omega I|V>=0$$

أو

$$<i|\Omega|V>-\omega I<i|V>=0$$

حيث $|V>=v_j|j>$.

وبإستخدام المعادلات (1.14a), (1.14), (1.16a) نحصل علي

$$\sum_j(\Omega_{ij}-\omega\delta_{ij})v_j=0 \qquad (1.19)$$

حيث ($v_i=\delta_{ij}v_j$). ويكون حل هذه المعادلة في صورة $\sum_m\omega^m=0$ والتي تُعرف بالمعادلة المميزة (Characteristic Equation)، ومنها نحصل علي قيم ω والتي تُعرف بالقيم الذاتية ($Eigen-values$).

1.5.1 أنواع المؤثرات

(1) المؤثر الهيرميتى (Hermitian Operator)

يُعرف المؤثر Ω بأنه مؤثر هيرميتي إذا كان $\Omega = \Omega^{+}$. ومن خواصه

(a) القيم المميزة لأي مؤثر هيرميتى تكون حقيقية.

البرهان: خذ معادلة القيمة الذاتية

$$\Omega | \omega >= \omega | \omega > \qquad (1.20)$$

وبضرب طرفي المعادلة اعلاه في $< \omega |$ نحصل على

$$< \omega | \Omega | \omega >= \omega < \omega | \omega > \qquad (1.21)$$

وبأخذ الـ **Adjoint** لطرفي المعادلة (1.20) نحصل على

$$< \omega | \Omega^{+} = \omega^{*} < \omega | \qquad (1.22)$$

وبضرب طرفي المعادلة (1.22) في $| \omega >$ من جهة اليمين نحصل على

$$< \omega | \Omega^{+} | \omega >= \omega^{*} < \omega | \omega > \qquad (1.23)$$

من المعادلتين (1.21) و (1.23) و بم أن $\Omega^{+} = \Omega$ فإن

$$< \omega | \Omega | \omega >= \omega^{*} < \omega | \omega > \qquad (1.24)$$

وبطرح (1.21) من (1.24) نحصل على

$$(\omega - \omega^{*}) < \omega | \omega >= 0 \qquad (1.25)$$

وبـم أن $< \omega | \omega > \neq 0$ فـإن $\omega = \omega^{*}$ أي أن ω عـدد حقيقـي (**real**). إذاً القـيم المميزة لأي مؤثر هيرميتى تكون قيم حقيقية.

(b) المتجهات الذاتية (**vectors-basis**) المختلفة لأي مؤثر هيرميتى تكون متعامدة والمتساوية تكون مُعّايرة.

<u>البرهان:</u>

$$\Omega | \omega_{i} >= \omega_{i} | \omega_{i} > \qquad (1.26)$$

$$\Omega | \omega_{j} >= \omega_{j} | \omega_{j} > \qquad (1.27)$$

بضـرب المعادلـة (1.26) فـي $< \omega_{j} |$ والمعادلـة (1.27) فـي $< \omega_{i} |$ نحصـل على

$$< \omega_{j} | \Omega | \omega_{i} >= \omega_{i} < \omega_{j} | \omega_{i} > \qquad (1.28)$$

$$< \omega_{i} | \Omega | \omega_{j} >= \omega_{j} < \omega_{i} | \omega_{j} > \qquad (1.29)$$

وبأخذ **Adjoint** للمعادلة (1.28) نحصل على

$$<\omega_i|\Omega^+|\omega_j>=\omega_i^*<\omega_i|\omega_j> \qquad (1.30)$$

وبطرح (1.30) من (1.29) نحصل على

$$(\omega_i-\omega_j^*)<\omega_i|\omega_j>=0$$

إذا كان $i=j$ نحصل على $<\omega_i|\omega_j>\neq 0$ وعليه فان $\omega_i=\omega_i^*$

أما إذا كان $i\neq j$ نحصل على $<\omega_i|\omega_j>=0$، أي أن القواعد $|\omega_i>$ تكون متعامدة لأي مؤثر هيرميتى **Hermitian**.

و كل المؤثرات الفيزيائية تكون مؤثرات هيرميتية وذلك لان القيم الذاتية لها قيم حقيقية (فيزيائية).

(2) المؤثر الأحادي (Unitary Operator)

يُعرف المؤثر Ω بأنه أحادى إذا حقق الشرط التالي

$$\Omega\Omega^+=\Omega^+\Omega=1$$

حيث نحصل علي Ω^+ من مدورة Ω ثم نأخذ المرافق لكل عنصر في المصفوفة.

مثال (1):

خُذ المؤثر

$$\Omega=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

(1) أوجد القيم الذاتية والدوال الذاتية للمؤثر Ω ؟

(2) هل المؤثر Ω هيرميتي ؟

الحل

(1) نعلم أن المعادلة المميزة هي

$$|\Omega-\omega I|=0$$

و منها نجد أن

$$\begin{vmatrix} 1-\omega & 0 & 0 \\ 0 & -\omega & -1 \\ 0 & 1 & 0-\omega \end{vmatrix} = (1-\omega)(\omega^2+1) = 0$$

وبحل هذه المعادلة نحصل علي $\omega = 1, \pm i$ وهي تمثل القيم الذاتية للمؤثر. ولإيجاد الدوال الذاتية نستخدم هذه القيم الذاتية في المعادلة أعلاه.

أولاً عندما تكون $\omega = 1$.

من معادلة القيمة الذاتية نحصل علي

$$(\Omega - \omega I) | V >= 0$$

وبكتابة $| V >= \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ تصبح هذه المعادلة في الصورة

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

التي تُعطى المعادلات التالية

$$0 = 0$$

$$-b - c = 0$$

$$b - c = 0$$

وهذا يعنى أن $b = c = 0$ وبالتالي يكون $a = 1$ ويكون المتجه المُعّاير هو

$$| V_1 >= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

ثانياً عندما تكون $\omega = i$.

من معادلة القيمة الذاتية نجد أن

$$(\Omega - \omega I) | V >= 0$$

والتي تأخذ الصورة

$$\begin{pmatrix} 1-i & 0 & 0 \\ 0 & -i & -1 \\ 0 & 1 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

وتُعطى المعادلات التالية

$$(1-i)a=0$$
$$-ib-c=0$$
$$b-ic=0$$

وحلها هو $a=0$ $b=ic$. ,

ويصبح المتجه المُعّاير $|V_2>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$ باختيار $c=1$.

ثالثاً عندما تكون $\omega=-i$.

تصبح معادلة القيمة الذاتية

$$(\Omega-\omega I)|V_3>=0$$

في الصورة

$$\begin{pmatrix} 1+i & 0 & 0 \\ 0 & i & -1 \\ 0 & 1 & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

التي تُعطى المعادلات التالية

$$(1+i)a=0$$
$$ib-c=0$$
$$b+ic=0$$

وبحلها نجد أن $a=0$, $b=-ic$, ليصبح المتجه المُعّاير $|V_3>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ -i \\ 1 \end{pmatrix}$

باختيار $c=1$.

(2) يكون المؤثر Ω هيرميتي إذا كان $\Omega = \Omega^{+}$. ونحصل علي Ω^{+} من مدورة Ω ثم أخذ المرافق لكل عنصر. وبم أن $\Omega^{+} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \neq \Omega$ فإن Ω مؤثر غير هيرميتي. وكذلك وبم أن أحد القيم الذاتية للمؤثر كانت غير حقيقية فان هذا يعني أن المؤثر Ω غير هيرميتي.

<u>مثال (2):</u>

خذ المؤثر

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

(أ) أثبت أن $A = A^{+}$.

(ب) أثبت الدوال الذاتية له متعامدة.

<u>الحل</u>

من معادلة القيمة الذاتية

$$|A - I\lambda| = 0$$

نجد أن

$\left| \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \right| = 0$ أو $\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = 0$ أي $\lambda^2 - 1 = 0$ إذا $\lambda = \pm 1$.

ونلاحظ أن القيمتين الذاتيتين حقيقيتان. وهذا يعني أن المؤثر A هيرميتي.

(ب) لإيجاد الدوال الذاتية عند $\lambda = +1$ تصير معادلة القيمة الذاتية في الصورة

$$\begin{pmatrix} -1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

وحلها هو أن $\begin{matrix} -c_1 - ic_2 = 0 \\ ic_1 - c_2 = 0 \end{matrix}$ أي $c_1 = -ic_2$ ومن المعادلة $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ ومنها نجد أن $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $c_2 = \frac{-i}{\sqrt{2}}$. وتكون الدالة الذاتية $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$.

وبنفس الطريقة عند $\lambda = -1$ نجد أن الدالـة الذاتيـة هـي $|\psi_2 >= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$. والآن نجد أن

$$< \psi_2 | \psi_1 >= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i & 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(i - i) = 0$$

وسبب هذا هو أن الدوال الذاتيـة ذات القيم الذاتيـة المختلفـة للمؤثر الهيرميتـى تكون متعامدة.

مثال (3):

إذا كان

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -2i \\ 0 & 2 & 0 \\ 2i & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(أ) هل المؤثر A هيرميتي ؟
(ب) أوجد القيم الذاتية والدوال الذاتية المناظرة لها.
(ت) أثبت أن المصفوفة P^+AP مصفوفة قطرية حيث P هي المصفوفة المكونة من الدوال الذاتية للمؤثر A.
(ث) أثبت أن عناصر المصفوفة P^+AP هي القيم الذاتية للمؤثر A.
(ج) إذا كان

$$v = \sum_{i=1}^{3} c_i X_i$$

حيث $| X_i >= X_i$ هي الدوال الذاتية للمؤثر A و $\mathrm{v} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$. أوجد الثوابت c_1, c_2, c_3 بدلالة الثوابت a,b,c.

الحل

(أ) نوجـد أولا مـدورة (transpose) المصـفوفة ثـم أخـذ المرافـق لكـل عناصـر المـدورة لنحصـل علـى A^{+}. سـنجد أن $A^{+}=A$ وهـذا هـو شـرط المـؤثر الهيرميتى.

(ب) من معادلة القيمة المميزة نجد أن

$$\begin{vmatrix} -1-\lambda & 0 & -2i \\ 0 & 2-\lambda & 0 \\ 2i & 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

ومنها نجد أن

$$(-1-\lambda)(2-\lambda)(-1-\lambda)-2i(-2i(2-\lambda))=0$$

والتي تُعطى

$$(2-\lambda)(\lambda^2+2\lambda-3)=0$$

ومنهـا نجـد أن $\lambda=1,2,-3$ وهـي تمثـل القيم الذاتيـة للمـؤثر A أعـلاه. لإيجـاد الدوال الذاتية المناظرة لهذه القيم نستعمل المعادلة

$$(A-\lambda I)X=0$$

عندما $\lambda=1$ تصبح المعادلة أعلاه

$$\begin{pmatrix} -2 & 0 & -2i \\ 0 & 1 & 0 \\ 2i & 0 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

أو

$$z=ix$$
$$y=0$$
$$x=-iz$$

وبإستخدام شرط المُعّايرة $|x|^2+|y|^2+|z|^2=1$ نجد أن $|X_1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix}$.

عندما $\lambda=2$ تصبح المعادلة أعلاه

$$\begin{pmatrix} -3 & 0 & -2i \\ 0 & 0 & 0 \\ 2i & 0 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

أو

$$3x = -2iz$$
$$2ix = 3z$$

وبإستخدام شرط المُعّايرة $|x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 1$ نجد أن $|X_2> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

عندما $\lambda = -3$ تصبح المعادلة أعلاه

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2i \\ 0 & 5 & 0 \\ 2i & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

أو

$$x = iz$$
$$y = 0$$

وبإستخدام شرط المُعّايرة $|x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 1$ نجد أن $|X_3> = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

(ت) وتكون المصفوفة المكوّنة من الدوال الثلاث هي

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(ث) و الآن نجد أن

$$P^\dagger AP = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1 & 0 & -2i \\ 0 & 2 & 0 \\ 2i & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -3i \\ 0 & 2\sqrt{2} & 0 \\ i & 0 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

ومن هنا نلاحظ أن العناصر القطرية تمثل القيم الذاتية للمصفوفة أعلاه، ونلاحظ أيضا أن

$$P^\dagger P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I$$

وتعـرف كـل مصــفوفة (P) التــي تحقـق هـذا الشـرط بالمصـفوفة الأحاديــة (**unitary**).

(ح) بم أن X_i دوال متعامدة، أي

$$X_j^\dagger X_i = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } i = j \\ 0 & \text{if } i \neq j \end{cases}$$

فإن

$$c_j = X_j^\dagger v$$

وبضرب طرفي المعادلة أعلاه في $| X_j >= X_j^+$ نحصل علي

$$X_j^\dagger v = \sum_{i=1}^{3} c_i X_j^\dagger X_i = \sum_{i=1}^{3} c_i \delta_{ij} = c_j$$

ومنها نجد أن

$$c_1 = X_1^\dagger v = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a - ic)$$

وبنفس الطريقة نجد أن

$$c_2 = b\,, \quad c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(c - ia)$$

مثال (4):

يمكـن تمثيـل حالـة جسـيم لـه غـزل $s=\frac{1}{2}$ بالحـالتين $|+>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ و $|->=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ للمـؤثر S_z حيـث $S_z\,|+>=\frac{1}{2}\hbar\,|+>$ و $S_z\,|->=-\frac{1}{2}\hbar\,|->$. إذا كـان المـؤثر $S_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$، أوجد الدالة الذاتية للمؤثر S_x المناظرة للقيمة الذاتية $-\frac{\hbar}{2}$.

الحل

من معادلـة القيمـة المميزة $|S_x-\lambda I|=0$ نجد أن القيم الذاتيـة $\lambda=\pm\frac{\hbar}{2}$. والدالـة الذاتية لـ $\lambda=-\frac{\hbar}{2}$ نحصل علي $|\psi_1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$ ويمكن كتابتها في الصورة

$$|\psi_1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right]$$

أو

$$|\psi_1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+>-|->\right)$$

مثال (5):

إذا كانت $|+>$ و $|->$ قواعد مكتملة (تحقق شرط التعامد والمُعّايرة) وكان

$$S_x=\frac{\hbar}{2}\left(\,|+><-|+|-><+|\right)$$

$$S_y=\frac{i\hbar}{2}\left(-|+><-|+|-><+|\right)$$

$$S_z=\frac{\hbar}{2}\left(|+><+|-|-><-|\right)$$

فأثبت أن:

(أ) S_x, S_y, S_z مـــؤثرات هيرميتيـــة (ب) $\left[S_x, S_y\right] = i\hbar S_z$ (ج) أثبـــت أن $S_x S_y = \frac{i\hbar}{2} S_z$ وكـذلك $S_y S_z = \frac{i\hbar}{2} S_x$ و $S_z S_x = \frac{i\hbar}{2} S_y$. (د) بكتابـة $|+>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ و $|->=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ اكتب شكل المصفوفة للمؤثرات الثلاثـة S_x, S_y, S_z، ثم تحقق من القوس في (ب) بدلالة مصفوفة هذه المؤثرات.

<u>الحل</u>

(أ) إذا كانت S_x, S_y, S_z مؤثرات هيرميتية فان $S_x = S_x^+$ و $S_y = S_y^+$ و $S_z = S_z^+$

أولاً نجد أن

$$S_x^+ = \frac{\hbar}{2}\left(|+><-|+|-><+|\right)^+$$

$$S_x^+ = \frac{\hbar}{2}\left(|+><-|+|-><+|\right)$$

$$S_x^+ = S_x$$

وثانياً نجد أن

$$S_y^+ = \frac{-i\hbar}{2}\left(|+><-|-|-><+|\right)^+$$

$$S_y^+ = \frac{-i\hbar}{2}\left(|-><+|-|+><-|\right)$$

$$S_y^+ = \frac{i\hbar}{2}\left(|+><-|-|-><+|\right)$$

$$S_y^+ = S_y$$

وثالثاً نجد أن

$$S_z^+ = \frac{\hbar}{2}\left(|+><+|-|-><-|\right)^+$$

$$S_z^+ = \frac{\hbar}{2}\left(|+><+|-|-><-|\right)$$

$$S_z^+ = S_z$$

(ب)

$$[S_x, S_y] = S_xS_y - S_yS_x$$

نعلم أن

$$\langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1$$ و $$\langle +|-\rangle = \langle +|-\rangle = 0 .$$

وبالتعويض نحصل علي

$$S_xS_y = \frac{\hbar}{2}\left(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right)\frac{i\hbar}{2}\left(-|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right)$$

$$S_xS_y = \frac{i\hbar^2}{4}\left(|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|\right)$$

وكذلك نجد أن

$$S_yS_x = \frac{i\hbar}{2}\left(-|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right)\frac{\hbar}{2}\left(|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|\right)$$

$$S_xS_y = \frac{i\hbar^2}{4}\left(-|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|\right)$$

والان يكون

$$[S_x, S_y] = S_xS_y - S_yS_x = \frac{i\hbar^2}{2}\left(|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|\right) = i\hbar S_z$$

(ج) إذا كـــان $|+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ و $|-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ فـــإن $\langle +| = \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}$ و $\langle -| = \begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}$

فبالتعويض نجد أن

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\0 & 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 & 0\\1 & 0\end{pmatrix}\right]$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$$

وبنفس الطريقة نجد أن

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

والآن نجد أن

$$S_x S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_x S_y = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

و

$$S_y S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y S_x = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

وبـــالطرح نجـــد أن $S_x S_y - S_y S_x = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = i\hbar \times \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar S_z$.

وبنفس الطريقة نحصل علي كل العلاقات الأخرى.

1.6 المؤثرات المتوافقة وغير المتوافقة

إذا أُعطينا حالة جسيم بدلالـة المتجـه $|\psi>$ فإننـا لا نستطيع أن نقول علـى وجـه العموم أن للجسيم قيمة محددة (definite) للمتغير الديناميكي Ω وهذه أحد سمات ميكانيكا الكم، أي أن القياس يعطى أي قيمة ذاتية (ω) إذا كان $<\omega|\psi>$ لا يساوى صفراً. وللحصول علـى مثل هذه الحـالات يلزمنـا فقط أن نأخذ حالـة عشـوائية (arbitrary) $|\psi>$ ونقـيس عنـدها ω. فـإن عمليـة القيـاس تعمـل كمنقى يعمل علـى امرار مركب واحد للحالـة $|\psi>$ فـي إتجـاه $|\omega>$ ويكـون إحتمال حدوث هذه الحالة هو

$$P(\omega) = |<\omega|\psi>|^2$$

نود الآن أن نعمم هذه الأفكار لأكثر من متغير واحد. فلنأخذ أولا حالـة مؤثرين Ω و Λ. إذا قسـنا أولاً Ω لمجموعـة مـن الجسـيمات معّرفـة بـــ $|\psi>$ وأخـذنا

الجسـيمات التـي تُعطـى النتيجـة ω، ثـم قسـنا بعـدها مباشـرة Λ ثـم أخـذنا هـذه الجسيمات التي تُعطى النتيجة λ. هل يكون لدينا مجموعة من الجسيمات لها حالة تعطى بـ $\omega=\Omega$ و $\lambda=\Lambda$؟ عموماً هذا لا يكون صحيحاً، وذلك لأنّه بعد ما قسنا أولاً Ω يكون لدينا منظومة في حالة $|\omega>$ ولكن لا نستطيع أن نقول شيئاً محدداً عن Λ وذلك لأنه قد لا تكون $|\omega>$ حالة ذاتية للمؤثر Λ. وبإجراء القياس الثاني فان الحالة تكون قد تغيرت إلى $|\lambda>=|\psi'>$. والآن نكون متأكدين في أننا سنحصل على λ للمؤثر Λ ولا شئ محدد للمؤثر Ω وذلك لان الحالة $|\lambda>$ قد لا تكون حالة ذاتية للمؤثر Ω، وفي بعض الحالات نجد أن الحالة المتحصل عليها بعد القياس الأول لا تتأثر بالقياس الثاني. وهذا بالتالي يتطلب أن تكون الحالة $|\omega>$ هي دالة ذاتية للمؤثر Λ و يمكن كتابة هذا رياضياً على الصورة:

$$\Omega|\lambda\omega>=\omega|\lambda\omega>$$
$$\Lambda|\lambda\omega>=\lambda|\lambda\omega>$$

السؤال المطروح هو: متى يكون للمؤثرين دالة ذاتية واحدة (مشتركة)؟ أي أن الدالة $|\lambda\omega>$ تكون دالة ذاتية للمؤثرين Ω Λ, آنيا (**simultaneously**) ؟ يُعطى الشرط الضروري (**necessary**) وليس الكافي (**sufficient**) بالمعادلة

$$\Omega\Lambda|\lambda\omega>-\Lambda\Omega|\lambda\omega>=0$$

إذن إذا كانت هنالك دالة ذاتية واحدة لـ Ω و Λ يكون $[\Omega,\Lambda]=0$. ونقول بان المؤثرين يجب أن يتبادلان لكي يحصلا على دالة ذاتية واحدة لهما. وعموماً فإذا كان $[\Omega,\Lambda]=0$ نقول بان Ω Λ, مؤثران متوافقان (**compatible**). فللجسيم الحر نجد أن $[H,p]=0$ ويعني هذا انه بالإمكان قياس الكميتين E و p آنياً (H مؤثر الطاقة و p مؤثر كمية الحركة).

أما إذا كان $[\Omega,\Lambda]\neq 0$ نقول بأن Ω و Λ غير متوافقين (**incompatible**). ومن أشهر مثالين للمؤثرات غير المتوافقة هما مؤثر الموقع $\hat{X}$ ومؤثر كمية الحركة $\hat{P}_x$ اللذان يحققان العلاقة بـ $[\hat{X},\hat{P}]=i\hbar$. من

الواضـح أنـه لا توجـد دالـة ذاتيـة مشـتركة للمـؤثرين $\hat{X}$ و $\hat{P}_x$، ولا يمكـن قيـاس الكميتين آنياً ويتفق هذا مع مبدأ هايزنبرج لعدم التأكيد.
إذا كان إحتمال قياس λ ثم قياس ω هو $P(\lambda,\omega)$ وأن إحتمال قيـاس ω ثم قيـاس λ بعدها مباشرة هو $P(\omega,\lambda)$، فإن $P(\omega,\lambda) \neq P(\lambda,\omega)$ على وجه العموم.

1.7 القيم المتوسطة (المتوقعة) للمؤثرات

تتم عملية قياس الكميات الفيزيائية في ميكانيكا الكم بتأثير المؤثر علي دالة الحالة الذاتيـة. عنـد إجـراء عمليـة القيـاس مـرة أخـرى لا نتوقـع الحصـول علـى نفـس النتيجة. وبـإجراء عدد كبير من القياسـات نوجد متوسط هذه القياسـات لنحصـل علـي أفضـل قيمـة للكميـة الفيزيائيـة تحـت الدراسـة. فـإذا كانـت دالـة حالـة الجسيم العامـة هـي $|\psi>$ فـإن متوسـط قيـاس الكميـة الفيزيائيـة التـي مؤثرهـا $\hat{A}$ يُعطـى بالمعادلة

$$<A> = <\psi|\hat{A}|\psi>$$

وبـم أن المؤثر A عبـارة عن مصفوفة فـإن هذه العمليـة هـي عمليـة ضـرب فـي العمود $|\psi>$ في المصفوفة A وضرب هذا الناتج في الصف $<\psi|$. وهي عمليـة سهلة وبسيطة وتعتمد على معرفتنا بالجبر الخطي. ومن هذا المتوسط يمكننـا أن نحسب الإنحراف المعياري لكل القيم التي نحصل عليها، ويُعرف هذا الإنحـراف المعيـاري فـي ميكانيكـا الكم بالخطـأ أو عدم التأكد (**Uncertainty**). ويُعطـى هذا الإنحراف بالمعادلة

$$\Delta A = \sqrt{<A^2> - <A>^2}$$

حيث $<A^2> = <\psi|\hat{A}^2|\psi>$ وهو عبـارة عن ضـرب مصـفوفة A^2 فـي العمـود $|\psi>$ ثـم ضـرب هـذا النـاتج فـي الصـف $<\psi|$. ولقـد وجـد العـالم النمسـاوي هـايزنبرج أن حاصـل ضـرب الخطـأ فـي قيـاس موقـع الجسيم والخطـأ فـي قيـاس كمية حركته يكون دائماً أكبر من أو يسـاوي $\frac{\hbar}{2}$، أي $\Delta x\, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$. وتنطبـق هـذه العلاقة علي كل الحالات المختلفة للجسيم تحت الدراسة. ويُعرف هذا بمبدأ عدم التأكـد لهـايزنبرج. ويـنص هـذا المبـدأ بأنّـه مـن المسـتحيل قيـاس الموقـع وكميـة الحركة لجسيم صـغير كـالإلكترون بدقـة تتجـاوز الحد فـي العلاقـة أعـلاه. ولـيس

سبب ذلك هو عدم دقة الأجهزة المستخدمة ولكن يرجع هذا إلى صميم طبيعة الجسيمات الدقيقة.
إذا كان الجسيم موجوداً في الحالة العامة $|\psi>$ التي يمكن كتابتها علي الصورة

$$|\psi>=c_1|1>+c_2|2>+c_3|3>$$

فإن $|c_1|^2$ هو إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|1>$ و $|c_2|^2$ هو إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|2>$ و $|c_3|^2$ هو إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|3>$. فمثلاً نحصل علي هذه $|c_1|^2$ بضرب المعادلة أعلاه من جهة اليسار في $<1|$ لتصبح

$$<1|\psi>=c_1<1|1>+c_2<1|2>+c_3<1|3>$$

وبـم أن $<1|1>=1$ و $<1|2>=<1|3>=0$ فـإن $c_1=<1|\psi>$ ومنهـا فـإن $|c_1|^2=|<1|\psi>|^2$. وبالمثل نجد أن

$$|c_2|^2=|<2|\psi>|^2 \text{ و } |c_3|^2=|<3|\psi>|^2$$

ونعلم أن المجموع الكلي للإحتمالات يساوي الوحدة ويعني هذا أن

$$|c_1|^2+|c_2|^2+|c_3|^2=1$$

وعموماً يُعطى إحتمال وجود جسيم حالته العامة $|\psi>$ أن يكون في الحالة الخاصة $|\varphi>$ بالمعادلة

$$P=|<\varphi|\psi>|^2$$

مثال (1):

إذا كانت $H|n>=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n>$ لمهتز توافقي في بعد واحد.
(أ) أوجد متوسط الطاقة للمهتز في الحالة العامة

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{14}}|1>-\frac{2}{\sqrt{14}}|2>+\frac{3}{\sqrt{14}}|3>$$

(ب) أثبت أن الدالة أعلاه عيارية.
(ج) ما هو إحتمال الحصول على الطاقة (i) $\frac{3}{2}\hbar\omega$ (ii) $\frac{5}{2}\hbar\omega$ (iii) $\frac{7}{2}\hbar\omega$.
(د) أثبت أن الإحتمال الكلي يساوي **1**.

الحل

يُعطى متوسط الطاقة بـ

$$<E>=<\psi|H|\psi>=(\tfrac{1}{\sqrt{14}}<1|-\tfrac{2}{\sqrt{14}}<2|+\tfrac{3}{\sqrt{14}}<3|)H(\tfrac{1}{\sqrt{14}}|1>-\tfrac{2}{\sqrt{14}}|2>+\tfrac{3}{\sqrt{14}}|3>)$$

حيث نعلم أن

$$H|1>=\tfrac{3}{2}\hbar\omega|1> \quad , \quad H|2>=\tfrac{5}{2}\hbar\omega|2> \quad , \quad H|3>=\tfrac{7}{2}\hbar\omega|3>$$

ومنها نجد أن $<E>=\frac{43}{14}\hbar\omega$.

(ب) تحقق الدالة المُعّايرة الشرط $<\psi|\psi>=1$ وبالتعويض نجد أن

$$<\psi|\psi>=(\frac{1}{\sqrt{14}}<1|-\frac{2}{\sqrt{14}}<2|+\frac{3}{\sqrt{14}}<3|)(\frac{1}{\sqrt{14}}|1>-\frac{2}{\sqrt{14}}|2>+\frac{3}{\sqrt{14}}|3>)=1$$

حيث

$<1|1>=<2|2>=<3|3>=1$ و $<1|2>=<2|3>=<3|1>=0$.

(ج) يُعطى إحتمال الحصول على الطاقة E_1 في الحالة $|\psi>$ بـ $P_1=|<1|\psi>|^2=\frac{1}{14}$ والحصول علي الطاقة E_2 بـ $P_2=|<2|\psi>|^2=\frac{4}{14}$ والطاقة E_3 بـ $P_3=|<3|\psi>|^2=\frac{9}{14}$.

(د) يكون الإحتمال الكلي $P=P_1+P_2+P_3=\frac{1}{14}+\frac{4}{14}+\frac{9}{14}=1$.

مثال (2):

إذا كانت حالة جسيم توصف بالدالة التالية

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}|-1>+\frac{1}{\sqrt{2}}|1>+\frac{1}{\sqrt{3}}|2>$$

حيث $|1>,|-1>,|2>$ قواعد مُعّايرة ومتعامدة. وإذا كانت القيم الذاتية لمؤثر A لهذه القواعد هي $-1,1,2$ علي التوالي، ما هي القيمة المتوقعة لقياس A ؟

الحل

تُعطى القيمة المتوقعة للمؤثر A بـ $<A>=<\psi|A|\psi>$ ونجد أن

$$<A>=(\frac{1}{\sqrt{6}}<-1|+\frac{1}{\sqrt{2}}<1|+\frac{1}{\sqrt{3}}<3|)A|(\frac{1}{\sqrt{6}}|-1>+\frac{1}{\sqrt{2}}|1>+\frac{1}{\sqrt{3}}|3>)=1$$

حيث $A|-1>=-1|-1>$ و $A|1>=+1|1>$ و $A|2>=2|2>$.

مثال (3):

إذا كان

$$\hat{A}|\psi>=a|\psi>$$

و

$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{B}+2\hat{B}\hat{A}^2$$

أثبــت أن الدالـــة $\hat{B}|\psi>$ هـــي دالـــة ذاتيـــة للمـــؤثر $\hat{A}$ وبقيمـــة ذاتيـــة تســـاوي $1+a+2a^2$.

الحل

بضرب المعادلة الثانية من جهة اليمين في $|\psi>$ نحصل على

$$[A,B]|\psi>=(B+2BA^2)|\psi>$$

$$(AB-BA)|\psi>=B|\psi>+2BA^2|\psi>$$

$$AB|\psi>-BA|\psi>=B|\psi>+2BA^2|\psi>$$

$$A(B|\psi>)-B(a|\psi>)=B|\psi>+2B(a^2|\psi>)$$

$$A(B|\psi>)=(1+a+2a^2)(B|\psi>)$$

ومن هذه المعادلـة نلاحظ أن الدالـة $(B|\psi>)$ هي دالـة ذاتيـة للمؤثر A وقيمتـها الذاتية هي $(1+a+2a^2)$.

مثال (4):

إذا كان المؤثر C يحقق المعادلات التالية

$$C^+C^+=0$$

$$CC^++C^+C=I$$

ويُعطى مؤثر هاملتون بـ

$$H=\alpha\,CC^+$$

حيث α عدد حقيقي.

(أ) أثبت أن $H=H^+$ (مؤثر هيرميتي).

(ب) أوجد تعبيراً لـ H^2 بدلالة H.

(ت) أوجد القيم الذاتية للمؤثر H.

الحل

(أ) $H^+ = (\alpha\, CC^+)^+ = (C^+)^+ C^+ \alpha^* = \alpha^* CC^+ = \alpha CC^+ = H$ (حيث $\alpha^* = \alpha$ عدد حقيقي).

(ب) $H^2 = HH = (\alpha\, CC^+)(\alpha\, CC^+) = \alpha^2 CC^+ CC^+$ ولكن $CC^+ = I - C^+C$ وبالتعويض نحصل علي

$$H^2 = \alpha^2 CC^+ CC^+ = \alpha^2 CC^+ (I - C^+C) = \alpha^2 CC^+ - \alpha^2 C(C^+C^+)C = \alpha^2 CC^+ - 0$$

إذاً $H^2 = \alpha(\alpha CC^+) = \alpha\, H$.

(ت) نكتب معادلة القيمة الذاتية للمؤثر H بالمعادلة

$$H\,|\psi> = E\,|\psi>$$

وبضرب طرفي المعادلة في H من جهة اليسار نحصل على

$$H^2\,|\psi> = EH\,|\psi>$$

$$\alpha\, H\,|\psi> = EH\,|\psi>$$

$$\alpha\, E\,|\psi> = E^2\,|\psi>$$

$$(E^2 - \alpha\, E)\,|\psi> = 0$$

$$E(E - \alpha)\,|\psi> = 0$$

وحلها هو أن $E = \alpha$ و $E = 0$ وهما القيمتان الذاتيتان للمؤثر H للدالة الذاتية $|\psi>$.

مثال (5):

يُعطى مؤثر هاملتون لمنظومة لها ثلاث حالات بـ

$$H = a\left(|1><2| + |2><3| + |3><2|\right)$$

حيث a مقدار ثابت له وحدة طاقة. أوجد (أ) القيم الذاتية للطاقة (ب) الدوال الذاتية المُعّايرة للطاقة بدلالة القواعد $|1>, |2>, |3>$. (ج) متوسط الطاقة للمنظومة.

الحل

(أ) نكتب معادلة القيمة الذاتية للمؤثر H علي الصورة

$$H\,|\psi> = E\,|\psi>$$

حيث E هي القيمة الذاتية للطاقة. وبم أن للمنظومة ثلاث حالات تكون الدالة $|\psi>$ علي الصورة العامة

$$|\psi>=c_1\,|1>+c_2\,|2>+c_3\,|3>$$

حيث c_1,c_2,c_3 ثوابت يجب تحديدها. وبالتعويض في معادلة القيمة الذاتية نجد أن

$$a(|1><2|+|2><3|+|3><2|)(c_1\,|1>+c_2\,|2>+c_3\,|3>)$$
$$=E(c_1\,|1>+c_2\,|2>+c_3\,|3>)$$

وبم أن

$$<1|1>=<2|2>=<3|3>=1 \quad \text{و} \quad <1|2>=<1|3>=<3|2>=0$$

فإن المعادلة أعلاه تصبح في الصورة

$$a\,c_2\,|1>+ac_3\,|2>+a\,c_2\,|3>=Ec_1\,|1>+Ec_2\,|2>+Ec_3\,|3>$$

وبمقارنة معاملات $|1>,|2>,|3>$ في الطرفين نحصل علي

$$a\,c_2=E\,c_1$$
$$a\,c_3=E\,c_2$$
$$a\,c_2=E\,c_3$$

التي نحصل منها علي أن $E=\pm\,a\,,0$ وهي القيمة الذاتية للطاقة.

(ب) تصبح الآن المعادلات أعلاه في الصورة

$$c_2=\sqrt{2}\,c_1$$
$$(c_1+c_3)=\sqrt{2}\,c_2$$
$$c_2=\sqrt{2}\,c_3$$

والتي تُعطى المعادلتين $c_2=\sqrt{2}\,c_1$ و $c_3=c_1$ ولإيجاد الثوابت c_1,c_2,c_3 نستخدم شرط المُعّايرة $|c_1|^2+|c_2|^2+|c_3|^2=1$ الذي يُعطى $c_1=\dfrac{1}{2}$ و $c_2=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$ و $c_3=\dfrac{1}{2}$. وتصبح الآن دالة الحالة المُعّايرة في الصورة

$$|\psi>=\frac{1}{2}|1>+\frac{1}{\sqrt{2}}|2>+\frac{1}{2}|3>$$

أو علي الصورة

$$|\psi> = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

(ج) يُعطى متوسط الطاقة بالمعادلة $<E> = \sum_{i=1}^{3} P_i E_i$ وبالتعويض عن $P_i = |c_i|^2$

نجد أن

$$<E> = |c_i|^2 \; E_i = \frac{1}{4}E_1 + \frac{1}{2}E_2 + \frac{1}{4}E_3 = \sqrt{2}\; a$$

حل آخر

يمكن كتابة مصفوفة هاملتون علي الصورة

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} \end{pmatrix}$$

حيث

$H_{11} = <1H|1> = 0$ و $H_{12} = <1H|2> = a$ و $H_{23} = <2|H|3> = a$

و هكذا.... لنحصل علي

$$H = a\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ويمكن بكل سهولة إيجاد القيم الذاتية والدالة الذاتية لهذا المؤثر حيث نحصل علي القيم الذاتية $a, 0, -a$.

1.8 دالة حالة الجسيم عند أي لحظة

في وصف شرودنجر لميكانيكا الكم تكون دالـة الحالـة معتمدة علـي الـزمن. فـإذا كانت $|\psi>=\sum_{i=1}^{n}<i|\psi>|i>$ هي دالـة حالـة الجسيم فـي البدء، فـإن دالـة الحالـة عند أي لحظة زمنية t نحصل عليها من معادلة شرودنجر المعتمدة علي الزمن، والتي تأخذ الشكل

$$|\psi(t)>=\sum_{i=1}^{n}<i|\psi>e^{\frac{-i E_i t}{\hbar}}|i>$$

حيث تمثل $|\psi>=|\psi(0)>$ هي دالة حالة الجسيم عند اللحظة $t=0$.

مثال (1):

تُوصف منظومة فيزيائية ما بالقواعد التالية

$$|1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\ , \qquad |2\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

إذا كان مؤثر هاملتون في هذه القواعد هو

$$H=\frac{\hbar\omega_0}{3}\begin{pmatrix}5 & \sqrt{2}\,i\\ -\sqrt{2}\,i & 4\end{pmatrix}$$

وكان

$$A=\frac{a}{3}\begin{pmatrix}2\sqrt{2} & -i\\ i & -2\sqrt{2}\end{pmatrix}\ , \qquad B=\frac{b}{3}\begin{pmatrix}1 & -4\sqrt{2}\,i\\ 4\sqrt{2}\,i & 5\end{pmatrix}$$

حيث a,ω_0,b ثوابت حقيقية وموجبة. إذا كانت المنظومـة فـي البـدء $(t=0)$ فـي الحالة

$$|\psi(0)\rangle=\sqrt{\frac{2}{5}}\,|1\rangle+\sqrt{\frac{3}{5}}\,|2\rangle$$

اجب علي الآتي:

(أ) إذا قيست الطاقة عند $t=0$ فما هي القيم التي نجدها وإحتمالاتها؟

(ب) أوجد متوسط الطاقة عند $t=0$.

(ت) إذا قسنا B عند $t=0$ بدلا عن الطاقة، فما هي النتـائج التـي سنحصـل عليها وإحتمالاتها؟

(ث) أوجد متوسط القيمة B في تلك اللحظة.

(ج) أوجد $|\psi(t)>$ و $\Delta A\,\Delta B$ عند $t=0$.

(ح) ما هي المؤثرات المتوافقة للمنظومة.

الحل

(أ) نحسب القيم الذاتية لمؤثر هاملتون بإستخدام المعادلة المميزة.

$$\begin{vmatrix} 5-\lambda & \sqrt{2}i \\ -\sqrt{2}i & 4-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 9\lambda + 18 = (\lambda-3)(\lambda-6) = 0\,, \quad \text{so } \lambda = 3, 6$$

ونجد أن القيم الذاتية هي $\hbar\omega_0\,, 2\hbar\omega_0$ وهي المقادير التي يتم قياسها.

وتكون الدوال الذاتية المناظرة لهذه القيم

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}i \end{pmatrix}\,, \qquad |E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}$$

تُعطى الدالة عند $t=0$ بـ $|\psi(0)>$ ويمكن كتابتها علي الصورة

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

يُعطى إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|E_1>$ و $|E_2>$ عند $t=0$ بالمعادلتين التاليتين

$$\mathcal{P}_1 = |\langle\psi(0)\,|\,E_1\rangle|^2 = \left|\frac{\sqrt{2}-\sqrt{6}i}{\sqrt{15}}\right|^2 = \frac{8}{15}$$

$$\mathcal{P}_2 = |\langle\psi(0)\,|\,E_2\rangle|^2 = \left|\frac{\sqrt{3}-2i}{\sqrt{15}}\right|^2 = \frac{7}{15}\,.$$

ويُعطى متوسط الطاقة عند $t=0$ بالمعادلة

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar\omega_0}{15}\,(\sqrt{2},\ \ \sqrt{3})\begin{pmatrix} 5 & \sqrt{2}\,i \\ -\sqrt{2}\,i & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} = \frac{22}{15}\,\hbar\omega_0$$

$$= \hbar\omega_0\,\frac{8}{15} + 2\hbar\omega_0\,\frac{7}{15}\,,$$

(ب) تُعطى القيم الذاتية للمؤثر B بالمعادلة

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & -4\sqrt{2}i \\ 4\sqrt{2}i & 5-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 6\lambda - 27 = (\lambda+3)(\lambda-9) = 0\,, \quad \text{so } \lambda = -3, 9$$

وتكون القيم المقاسة للمؤثر B هي $-b, 3b$. والدوال الذاتية المنـاظرة لهذه القيم هي

$$|b_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}\,, \qquad |b_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}i \end{pmatrix}$$

ويُعطى إحتمال وجود المنظومة فـي الحـالتين أعـلاه بـالقيم الذاتيـة المنـاظرة لهمـا عند $t=0$ بالمعادلتين

$$Q_1 = |\langle \psi(0) \,|\, b_1 \rangle|^2 = \frac{7}{15}\,;$$
$$Q_2 = |\langle \psi(0) \,|\, b_2 \rangle|^2 = \frac{8}{15}\,.$$

وتُعطى القيمة المتوسطة للمؤثر B عند $t=0$ بالمعادلة

$$\langle\, B \,\rangle = \frac{b}{15} \left(\sqrt{2}, \;\; \sqrt{3}\right) \begin{pmatrix} 1 & -4\sqrt{2}\,i \\ 5\sqrt{2}\,i & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} = \frac{17}{15}\, b$$
$$= -b\,\frac{7}{15} + 3b\,\frac{8}{15}\,,$$

كما هو متوقع.

(ب) يُعطى حل معادلة شرودنجر المعتمدة على الزمن بالدالة التالية

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} |E_1\rangle\langle E_1 \,|\, \psi(0)\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} |E_2\rangle\langle E_2 \,|\, \psi(0)\rangle$$

حيث

$$\langle E_1 \,|\, \psi(0)\rangle = (\sqrt{2} - \sqrt{6}i)/\sqrt{15}$$
$$\langle E_2 \,|\, \psi(0)\rangle = (\sqrt{3} - 2i)/\sqrt{15}\,.$$

ومنها نجد أن

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t} \frac{1}{3\sqrt{5}} (\sqrt{2} - \sqrt{6}i) \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}i \end{pmatrix} + e^{-i2\omega_0 t} \frac{1}{3\sqrt{5}} (\sqrt{3} - 2i) \begin{pmatrix} \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}$$

(ج) نعلم أنه عند $t=0$ يكون

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A,B] \rangle_0| \qquad (a)$$

حيث $[A,B] = AB - BA$. وبالتعويض نجد أن

$$AB = \frac{ab}{9} \begin{pmatrix} 2\sqrt{2} & -i \\ i & -2\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -4\sqrt{2}\,i \\ 4\sqrt{2}\,i & 5 \end{pmatrix}$$
$$= \frac{ab}{9} \begin{pmatrix} 6\sqrt{2} & -21i \\ -15i & -6\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

وكذلك

$$BA = \frac{ab}{9} \begin{pmatrix} 1 & -4\sqrt{2}\,i \\ 4\sqrt{2}\,i & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\sqrt{2} & -i \\ i & -2\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
$$= \frac{ab}{9} \begin{pmatrix} 6\sqrt{2} & 15i \\ 21i & -6\sqrt{2} \end{pmatrix},$$

ومن الواضح أن

$$[A,B] = -4i\,ab \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

وبالتعويض في المعادلة (a) نجد أن

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A,B] \rangle_0|$$
$$= \frac{2\,ab}{5} \left| (\sqrt{2}, \ \ \sqrt{3}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \right| = \frac{4\sqrt{6}\,ab}{5}$$

(ح) للحصـول علـى المـؤثرات المتوافقـة نقـوم بإيجـاد أقـواس التبـادل مـع كـل المؤثرات للمنظومة، أي

$$[H,A], \quad [H,B], \quad [A,B]$$

أولا نجد أن

$$HA = \frac{\hbar\omega_0\,a}{9} \begin{pmatrix} 5 & \sqrt{2}\,i \\ -\sqrt{2}\,i & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\sqrt{2} & -i \\ i & -2\sqrt{2} \end{pmatrix} = \hbar\omega_0\,a \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -i \\ 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

و

$$AH = \frac{\hbar\omega_0\, a}{9}\begin{pmatrix} 2\sqrt{2} & -i \\ i & -2\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & \sqrt{2}\, i \\ -\sqrt{2}\, i & 4\end{pmatrix} = \hbar\omega_0\, a\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ i & -\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

وبالتالي يكون

$$[H, A] = -i\hbar\omega_0\, a\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix} \neq 0$$

ثانيا نجد أن

$$HB = \frac{\hbar\omega_0\, b}{9}\begin{pmatrix} 5 & \sqrt{2}\, i \\ -\sqrt{2}\, i & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -4\sqrt{2}\, i \\ 4\sqrt{2}\, i & 5\end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_0\, b}{3}\begin{pmatrix} -1 & -3\sqrt{2}i \\ 3\sqrt{2}i & 4\end{pmatrix}$$

وكذلك

$$BH = \frac{\hbar\omega_0\, b}{9}\begin{pmatrix} 1 & -4\sqrt{2}\, i \\ 4\sqrt{2}\, i & 5\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & \sqrt{2}\, i \\ -\sqrt{2}\, i & 4\end{pmatrix} = \frac{\hbar\omega_0\, b}{3}\begin{pmatrix} -1 & -3\sqrt{2}i \\ 3\sqrt{2}i & 4\end{pmatrix}$$

(ح) من الواضح أن $[H\,,B]=0$ ولكن $[H\,,A]\neq 0$ و $[A\,,B]\neq 0$. وهذا يعني أن المؤثر H متوافق فقط مع المؤثر B ، وبالتالي تكون لهما نفس الدالة الذاتية. إذاً $|b_1>=|E_2>$ و $|b_1>=|E_2>$.

مثال (2):

يتواجد جسيم في إحدى الحالتين $|1>$ و $|2>$، ويمكن أن ينتقل هذا الجسيم من حالة إلى أخرى. إذا كان $<1|H|1>=<2|H|2>=E_0$ حيث E_0 طاقة الجسيم. ومُعّدل نفاذه K يُعطى بـ $<1|H|2>=<2|H|1>=-K$ حيث H هو مؤثر هاملتون للجسيم.

(أ) كون مصفوفة مؤثر هاملتون H ثم أوجد القيم الذاتية والدوال الذاتية له.

(ب) إذا كانت $P|1>=|2>$ و $P|2>=|1>$ فأوجد مصفوفة المؤثر P (يُعرف P بمؤثر القطبية) .

(ج) هل تكون القيم الذاتية لمؤثر هاملتون هي نفس القيم الذاتية لـ P ؟ وإذا كان ذلك كذلك فأوجد قطبية الدوال الذاتية للطاقة.

(د) إذا كان سعة إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|1>$ عند $t=0$ يساوي $e^{i\delta}$ مضروبا في سعة إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|2>$. أوجد الدالة الذاتية للجسيم عند أي لحظة t.

(هـ) أوجد مُعّدل تغير إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|2>$ عند أي لحظة t.

الحل

(أ) تُعطى مصفوفة المؤثر H بـ $H=\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$ حيث $H_{11}=<1|H|1>$ و $H_{12}=<1|H|2>$ و $H_{21}=<2|H|1>$ و $H_{22}=<2|H|2>$. وبـــالتعويض نحصل علي

$$H=\begin{pmatrix} E_0 & -K \\ -K & E_0 \end{pmatrix}$$

وبحل معادلة القيمة المميزة $\begin{vmatrix} E_0-E & -K \\ -K & E_0-E \end{vmatrix}=0$ نجد القيمة الذاتية (E) تساوي $E_{\pm}=E_0 \mp K$. ومنها نجد أن الدوال الذاتية هي $|\psi_{+}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ و $|\psi_{-}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. ويمكن كتابتهما في الصورة

$$|\psi_{+}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}+\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}|1>+\frac{1}{\sqrt{2}}|2>$$

و

$$|\psi_{-}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}|1>-\frac{1}{\sqrt{2}}|2>$$

تُعطى مصفوفة المؤثر P بـ $P=\begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix}$، حيث

$$P_{11}=<1|P|1>=<1|2>=0 \text{ و } P_{12}=<1|P|2>=<1|1>=1$$

و

$$P_{21}=<2|P|1>=<2|2>=1 \text{ و } P_{22}=<2|P|2>=<2|1>=0$$

وذلك لأن

$P|1>=|2>$ و $P|2>=|1>$.

إذاً تصبح مصفوفة مؤثر القطبية في الصورة $P=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$. وبإيجاد الدوال الذاتية لهذا المؤثر نجد أنها مطابقة للدوال الذاتية لمؤثر H. وسبب ذلك أن هذا المؤثر يتبادل مع مؤثر هاملتون $[P,H]=0$ وبالتالي لهما نفس الدوال الذاتية. ويعني القوس $[P,H]=0$ أن القطبية مقدار ثابت (من معادلة هايزنبرج للحركة). ونجد أن قطبية الدالتين $|\psi_+>$ و $|\psi_->$ هما:

$$P|\psi_+>=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}=+|\psi_+>$$

و

$$P|\psi_->=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\ 1\end{pmatrix}=-|\psi_->$$

إذاً نجد أن الحالة $|\psi_+>$ قطبيتها موجبة والحالة $|\psi_->$ قطبيتها سالبة. ومن مؤثر القطبية نجد أن القيم الذاتية له هي ±1.

(ج) تكتب دالة الموجة عند أي لحظة t بـ

$$|\psi(t)>=C_+\exp(-\frac{iE_1t}{\hbar})|\psi_+>+C_-\exp(-\frac{iE_2t}{\hbar})|\psi_->$$

حيث $E_1=E_+$ و $E_2=E_-$ و C_-,C_+ ثوابت. فعند $t=0$ نجد أن

$$|\psi(0)>=C_+|\psi_+>+C_-|\psi_->$$

$$|\psi(0)>=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1>+e^{i\delta}|2>\right)$$

ولكن $C_1=e^{i\delta}C_2$. إذاً

$$C_+=\frac{1}{2}(1-e^{i\delta})$$

$$C_-=\frac{1}{2}(1+e^{i\delta})$$

وبالتالي تصبح الدالة $|\psi(0)>$ علي الصورة

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}\left\{(1-e^{i\delta})\,|\psi_+\rangle + (1+e^{i\delta})\,|\psi_-\rangle\right\} \;,$$
$$= e^{-i\delta/2}\left\{\cos(\delta/2)\,|\psi_-\rangle + i\sin(\delta/2)\,|\psi_+\rangle\right\}$$

(د) لإيجاد إحتمال وجود الجسيم في الحالة $|2>$ عند أي لحظة نوجد أولاً دالة الموجة عند أي لحظة t كما يلي

$$|\psi(t)>= C_1 \exp(\frac{-iE_+t}{\hbar})\,|\psi(0)>$$

وبالتعويض عن C_1 تأخذ $|\psi(t)>$ الصورة

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i(E_0 t/\hbar+\delta/2)}$$
$$\times\left\{\cos(\delta/2)\,e^{iKt/\hbar}|\psi_-\rangle + i\sin(\delta/2)\,e^{-iKt/\hbar}|\psi_+\rangle\right\}$$

ومن ثم يكون الإحتمال هو $P_2 = |<2|\psi(t)>|^2$. ونجد أن

$$\langle 2\,|\,\psi(t)\rangle = e^{-i(E_0 t/\hbar+\delta/2)}\left\{\cos(\delta/2)\,e^{iKt/\hbar} - i\sin(\delta/2)\,e^{-iKt/\hbar}\right\}$$

إذاً

$$P_2(t) = |\langle 2\,|\,\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{2}\left\{1+\sin\delta\,\sin(2Kt/\hbar)\right\}$$

ويكون مُعّدل تغير هذا الإحتمال هو $\Gamma_2 = \frac{dP}{dt}$، أي

$$\Gamma_2(t) = \frac{\mathrm{d}P_2(t)}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{K}{\hbar}\right)\,\sin\delta\,\cos(2Kt/\hbar)\;,$$
$$= \left(\frac{K}{\hbar}\right)\,\sin\delta\,\left\{1-(Kt/\hbar)^2+\cdots\right\}$$

حيث إستخدمنا الشرط

$$(2Kt/\hbar) \ll 1$$

وتمثل Γ_2 المُعّدل الذي تصبح به الحالة $|2>$ ممتلئة.

<u>مثال (3):</u>

إذا كـان للمؤثر A القيمتـان الذاتيتان a_1 و a_2 المقابلتـان للدالتين الذاتيتين $|a_1>$ و $|a_2>$ وكــذلك للمــؤثر B القيمتـــان الـــذاتيتان b_1 و b_2 المقابلتـــان للـــدالتين الذاتيتين $|b_1>$ و $|b_2>$ اللذان يرتبطان بالمعادلتين التاليتين

$$|a_1\rangle = \frac{3}{5}|b_1\rangle + \frac{4}{5}|b_2\rangle$$
$$|a_2\rangle = \frac{4}{5}|b_1\rangle - \frac{3}{5}|b_2\rangle$$

إذا تم قياس A وحصلنا على القيمة a_1 فما هي حالة المنظومة بعد عملية القياس مباشرة؟ ($|a_1>$) وإذا تم الآن قياس B، فما هي القيم التي سنحصل عليها، وما هو إحتمال الحصول على كل قيمة؟ ($|<b_1|a_1>|^2 = \frac{9}{25}$) و $|<b_2|a_1>|^2 = \frac{16}{25}$

إذا قيس A مرة أخرى بعد قياس B مباشرة، فما هو إحتمال الحصول علي القيمة a_1 ؟ إذا قيست b_1 فإن المنظومة تكون في الحالة $|b_1>$ وإحتمال وجود المنظومــة فــي الحالــة $|a_1>$ هــو $|<a_1|b_1>|^2 = \frac{9}{25}$. أمــا إذا قيســت b_2 فــإن المنظومة تكون في الحالة $|b_2>$، فإن إحتمال وجود المنظومة في الحالة $|a_1>$ هــي $|<a_1|b_2>|^2 = \frac{16}{25}$. وإذا كـان نـاتج قيـاس B غيـر معروفـاً فـإن إحتمـال قياس a_1 مرة أخرى تكون $1 = \frac{9}{25} + \frac{16}{25}$.

(4) هـل يمكـن قيـاس A و B آنيـاً ؟ لا يمكـن قيـاس A و B آنيـاً وذلـك لأن الدوال الذاتية (القواعد) A و B مختلفتان!

مثال (4):

جسـيم كتلتـه m موضـوع فـي جهـد تـوافقي فـي بُعـد واحـد تـردده ω. فـإذا كـان الجسـيم عنـد $t = 0$ فـي الحالـة العامـة $|\psi(0)>= a_0|0> + a_1|1>$. أوجـد القـيم الذاتية والدوال الذاتية عند أي لحظة t مستخدماً القواعد $|0>$ و $|1>$، علمـاً بـأن

طاقـة الحالـة الأرضـية والمثـارة الأولـى همـا $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ و $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ علـي الترتيب.

الحل

تمثل القواعد $|0>$ الحالة الأرضية و $|1>$ الحالة المثارة الأولى للجسيم. تُوصف الحالة العامة للجسيم بالمعادلة

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \, e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

حيث

$$C_n = < n | \psi(0) > .$$

نجد الآن أن $C_0 = < 0 | \psi(0) > = a_0$ و $C_1 = < 1 | \psi(0) > = a_1$

$$|\psi(t)\rangle = a_0 \, e^{-i\omega t/2}|0\rangle + a_1 \, e^{-3i\omega t/2}|1\rangle$$

تُعطى طاقة الجسيم من معادلة شرودنجر

$$H | \psi > = E | \psi >$$

علماً بان طاقة المهتز التوافقي تُعطى بـ

$$H | 0 > = \frac{1}{2}\hbar\omega | 0 > \text{ و } H | 1 > = \frac{3}{2}\hbar\omega | 1 >$$

وبالتالي تصبح طاقة الجسيم الكلية

$$H | \psi(t) > = \left(a_0 \exp(-\frac{i\omega t}{2}) H | 0 > + a_1 \exp(-\frac{3i\omega t}{2}) H | 1 > \right)$$

التي تُعطى

$$H | \psi(t) > = \left(a_0 \exp(-\frac{i\omega t}{2}) \frac{1}{2}\hbar\omega | 0 > + a_1 \exp(-\frac{3i\omega t}{2}) \frac{3}{2}\hbar\omega | 1 > \right)$$

وبالتعويض نجد أن $E = 2\hbar\omega$.

1.9 معادلة تغير المؤثرات

نجد في وصف هايزنبرج لميكانيكا الكم أن المؤثرات تتغير مع الزمن. ويُعطى المُعّدل الزمن لتغير هذه المؤثرات بمعادلة هايزنبرج للحركة. فإذا كان المؤثر A يتغير مع الزمن فإنه يحقق المعادلة

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A, H] + \frac{\partial A}{\partial t}$$

حيث H هو مؤثر الطاقة (هاملتون) للمنظومة التي وُصفت كميتها الفيزيائية بالمؤثر A. ونجد في أغلب الأحيان أن المؤثر A لا يعتمد علي الزمن صراحة، وفى هذه الحالة يكون $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$، وبالتالي تأخذ معادلة حركة المؤثر علي الصورة

$$\frac{dA}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A, H]$$

والآن إذا كان $[A, H] = 0$ فإن $\frac{dA}{dt} = 0$، أي $A = const.$ وبالتالي فإن الكمية التي يمثلها المؤثر A تكون ثابتة (محافظة). ويمكن أن نقول أن الكمية الفيزيائية تكون محافظة إذا تبادل مؤثرها مع مؤثر هاملتون للمنظومة تحت الدراسة. وبم أن مؤثر هاملتون (مُمثل الطاقة الكلية) يتبادل مع نفسه، فإن هذا يعني أن الطاقة الكلية للجسيم (المنظومة) تكون دائماً محافظة (ما لم يعتمد H علي الزمن صراحة)، ويتفق هذا مع الميكانيكا التقليدية.

1.10 العلاقة بين وصف شرودنجر و هايزنبرج لميكانيكا الكم

نجد في وصف شرودنجر لميكانيكا الكم أن الاعتماد الزمني مضمن في الدالة $|\psi(t)>$، وتكون المؤثرات مستقلة عن الزمن، مثل x و p_x حيث $\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial p_x}{\partial t} = 0$. أما في وصف هايزنبرج لميكانيكا الكم نجد أن التطور الزمني مضمن في المؤثرات بينما تكون دالة الموجة للجسيم مستقلة عن الزمن. ونجد أن مُعّدل متوسط القيم المتوسطة للمؤثر A عند شرودنجر يُعطى بالمعادلة

$$\frac{d}{dt} < A >= \frac{1}{i\hbar} < [A,H] >$$

حيث $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$ وذلك لأن المؤثر لا يعتمد علي الزمن صراحة، بينما يُعطى مُعّدل متوسط القيم المتوسطة في وصف هايزنبرج بالمعادلة

$$\frac{d}{dt}< A >=\frac{1}{i\hbar}<[A,H]>+<\frac{\partial A}{\partial t}>$$

وذلك لان المؤثر هنا يعتمد علي الزمن. ويتم الانتقال بين الوصفين عن طريق تحويل يُعرف بالتحويل الأحادي الذي يوصف بالمؤثر الأحادي U . ونجد أن

$$|\psi_H>=U^+(t,t_0)|\psi_S(t)>$$

حيث يرمز الرمز S لشرودنجر والرمز H لهايزنبرج. ونجد أن U يحقق الشرط

$$U^+(t,t_0)=U(t_0,t)$$

وبالتالي يمكننا كتابة المعادلة اعلاه في الصورة

$$|\psi_H>=U(t_0,t)|\psi_S(t)>=|\psi(t_0)>$$

ومن الواضح أن دالة موجة هايزنبرج مستقلة عن الزمن. والآن إذا رمزنا للمؤثر A في وصف شرودنجر بالرمز A_S فإن وصف هذا المؤثر عند هايزنبرج سيصبح علي الصورة

$$A_H=U^+(t,t_0)A_SU(t,t_0)=U(t_0,t)A_SU^+(t_0,t)$$

نلاحظ أن A_H يعتمد علي الزمن حتى أن لم يكن A_S معتمداً علي الزمن.

والآن نجد أن

$$\frac{dA_H}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left(-UHA_SU^+ +UA_SHU^+\right)+U\frac{\partial A_S}{\partial t}U^+$$

$$\frac{dA_H}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left(-UHU^+UA_SU^+ +UA_SU^+UHU^+\right)+U\frac{\partial A_S}{\partial t}U^+$$

وذلــــــك لان $U^+U=UU^+=1$. وإذا وضــــــــعنا $\left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right)_H=U\frac{\partial A_S}{\partial t}U^+$ و $A_H=UA_SU^+$ و $H_H=UHU^+$ نحصل علي

$$\frac{dA_H}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[A_H,H_H]+\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H$$

وهي معادلة هايزنبرج لحركة المؤثر A_H . نجد أن المؤثر U يمكن كتابته علي الصورة

$$U(t,t_0)=\exp\left(\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right)$$

وبالتالي نجد أن

$$H_H=UHU^{+}=H$$

وبم أن مؤثر هاملتون H لا يعتمد علي الزمن في تمثيل شرودنجر فإن مؤثر هاملتون لا يعتمد علي الزمن في تمثيل هايزنبرج أيضاً.

مثال (1):

أوجد معادلة حركة المؤثرين x و p_x في وصف هايزنبرج. نعلم أن هذين المؤثرين لا يعتمدان علي الزمن في وصف شرودنجر، أي $\frac{\partial x}{\partial t}=\frac{\partial p_x}{\partial t}=0$. وفى وصف هايزنبرج نجد أن

$$\frac{dx_H}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[x_H,H_H]+\left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)_H$$

$$\frac{dx_H}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[x_H,H_H]$$

التي تُعطى المعادلة

$$\frac{dx_H}{dt}=\frac{\partial H_H}{\partial p_{xH}}$$

وكذلك

$$\frac{dp_{xH}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[p_{xH},H_H]+\left(\frac{\partial p_x}{\partial t}\right)_H$$

$$\frac{dp_{xH}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[p_{xH},H_H]$$

التي تُعطى المعادلة

$$\frac{dp_{xH}}{dt}=-\frac{\partial H_H}{\partial x_H}$$

نعلم أن المعادلتين السابقتين تُعرفان بمعادلتي هاملتون في الميكانيكا الكلاسيكية، وبالتالي نجد أن وصف هايزنبرج يقابل صياغة ديناميكية كمية تكون أقرب

شكلاً للميكانيكا الكلاسيكية. وبم أن صياغتي شرودنجر و هايزنبرج يرتبطان بتحويل أحادى فإن كل الكميات الفيزيائية، مثل القيم الذاتية والمتوسطات للقيم المرصودة الفيزيائية تكون متطابقة في كل أي صياغة وصفت.

مثال (2):

إذا كان O مؤثراً فأثبت أن معادلة حركة المؤثر O^2 في تمثيل هايزنبرج تُعطى بـ

$$\frac{d}{dt}(O_H)^2 = \frac{1}{i\hbar}[(O_H)^2, H_H]$$

ثم وّضح بأن

$$\frac{d}{dt}(O)^2{}_H = \frac{d}{dt}(O_H)^2 \neq 2O_H \frac{dO_H}{dt}$$

الحل

تُعطى معادلة حركة المؤثر في تمثيل هايزنبرج بـ

$$\frac{d}{dt}(O^2)_H = \frac{d(O_H)^2}{dt} = 2O_H \frac{dO_H}{dt} + [\frac{dO_H}{dt}, O_H]$$

وبالتعويض عن $\frac{dO_H}{dt}$ من المعادلة $\frac{dO_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[O_H, H_H]$ نحصل علي

$$\frac{d(O_H)^2}{dt} = 2O_H \frac{dO_H}{dt} + [\frac{dO_H}{dt}, O_H] = 2O_H \frac{dO_H}{dt} + \frac{dO_H}{dt} O_H - O_H \frac{dO_H}{dt}$$

$$\frac{d(O_H)^2}{dt} = O_H \frac{dO_H}{dt} + \frac{dO_H}{dt} O_H = O_H \frac{1}{i\hbar}[O_H, H_H] - O_H \frac{1}{i\hbar}[O_H, H_H]$$

$$\frac{d(O_H)^2}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[(O_H(O_H H_H - H_H O_H) - O_H(O_H H_H - H_H O_H)]$$

$$\frac{d(O_H)^2}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[(O_H)^2 H_H - O_H H_H O_H - (O_H)^2 H_H + O_H H_H O_H)\right]$$

$$\frac{d(O_H)^2}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[(O_H)^2 H_H - (O_H)^2 H_H\right] = \frac{1}{i\hbar}\left[(O_H)^2, H_H\right]$$

$$\frac{d(O_H)^2}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[(O_H)^2, H_H\right]$$

إذا نجد أن

$$\frac{d(O_H)^2}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[(O_H)^2, H_H]$$

تمرين:

(1) إذا كان مؤثر هاملتون لمنظومة يُعطى بـ $\hat{H}=(\hat{N}+\frac{1}{2})\,\hbar\omega$
حيث

$$\hat{N}=a^{+}a$$

و

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q+i\frac{p}{m\omega}\right)$$
$$a^{\dagger}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(q-i\frac{p}{m\omega}\right)$$

(أ) أوجد مُعّدل التغير في متوسط a و a^{+} ومن ثم أوجد a و a^{+} بدلالة الزمن t.

(ب) أوجد أقواس التبادل التالية $[a\,,a^{+}]$ و $[H\,,a^{+}]$ و $[H\,,a^{+}a]$ علما بأن $[q\,,p]=i\hbar$.

(ت) إذا كان $a\,|\,n>=\sqrt{n}\,|\,n-1>$ أوجد $\hat{H}\,|\,n>$ و $\hat{N}\,|\,n>$ و $a^{+}\,|\,n>$

(ث) أثبت أن الدالة $a^{+}\,|\,n>$ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{N}$ وقيمتها الذاتية تساوي $(1+n)$.

(ج) كوّن مصفوفات المؤثرات $a\,,a^{+},N$ في القواعد المكتملة $|1>$ و $|2>$ التي تحقق الشروط التالية

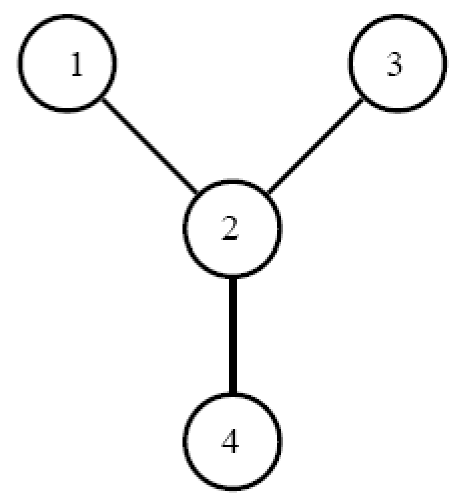
$$<1\,|\,2>=<2\,|\,1>=0 \text{ و } <1\,|\,1>=<2\,|\,2>=1$$

(د) أوجد الخطأ في قياس موضع الجسيم (q).

(ذ) إذا كانـت دالـة حالـة الجسـيم فـي الصـورة العامـة $|\psi>=\begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}$، أوجـد إحتمـال وجـود الجسـيم فـي الحالـة $|1>$ و $|2>$ (تـذكر أن الإحتمـالي لوجود الجسيم يساوي1).

أمثلة متنوعة:

(1) يمكن لإلكترون حر أن ينتقل بين الذرات عند المواقع الأربعة الموضحة أدنـاه. إذا كانـت طاقـة الإلكتـرون عنـد كـل مـن هـذه المواقـع هـي $\hbar\omega$. ويمكـن للإلكتـرون أن ينتقل فقط بطاقة مقدارها $-\hbar\Gamma$ بـين المواقـع الموصـلة بخطـوط متصلة (انظر الرسم).



(أ) أوجد مؤثر هاملتون لهذه المنظومة.
(ب) أوجـد كـل الطاقـات الممكنـة. وهـل هـذه الطاقـات متسـاوية أم لا ؟ وضـح بالرسم مستويات الطاقات المتساوية.
(ج) أوجد الدوال الذاتية ثم وّضح أنها متعامدة.
(د) إذا كان الإلكترون عند $t=0$ في الموقع (الحالة) $|2>$ فأوجد إحتمـال وجـود الإلكترون عند الموقع $|1>$ عند أي لحظة زمنية t.

الحل

(أ) نرمز أولا للحالات (القواعد) الأربعة بـ $|1\rangle$ و $|2\rangle$ و $|3\rangle$ و $|4\rangle$.
يُعطى مؤثر هاملتون بالمصفوفة

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & H_{14} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & H_{24} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & H_{34} \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44} \end{pmatrix}$$

حيث $\langle i|H|j\rangle = H_{ij}$ تمثل طاقة الإنتقال بين الحالتين $|i\rangle$ و $|j\rangle$ وبالتالي يصبح مؤثر هاملتون في الصورة

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \omega & -\Gamma & 0 & 0 \\ -\Gamma & \omega & -\Gamma & -\Gamma \\ 0 & -\Gamma & \omega & 0 \\ 0 & -\Gamma & 0 & \omega \end{pmatrix}$$

حيث يمثل $\omega = H_{11}$ طاقة الإلكترون في الموقع $|1\rangle$ و $H_{12} = -\hbar\Gamma$ طاقة الإلكترون إذا انتقل من الحالة $|2\rangle$ إلى $|1\rangle$ وهكذا...

(ب) لإيجاد قيم الطاقة نكتب المعادلة المميزة

$$\det\{H - \hbar\lambda I\} = \hbar^4 (\omega - \lambda)^2 \left[(\omega - \lambda)^2 - 3\Gamma^2 \right] = 0$$

والتي تُعطى القيم التالية

$$\lambda_1 = \omega,\ \lambda_2 = \omega,\ \lambda_3 = \omega + \sqrt{3}\Gamma, \text{ and } \lambda_4 = \omega - \sqrt{3}\Gamma.$$

(ج) بالتعويض عن قيم الطاقة المختلفة نجد أن الدوال الذاتية المناظرة هي

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \lambda_1 = \omega\,, \qquad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda_3 = \omega - \sqrt{3}\Gamma$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \lambda_2 = \omega\,, \qquad |v_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \lambda_1 = \omega + \sqrt{3}\Gamma$$

(د) نكتب دالة الموجة عند أي لحظة بـ

$$|\, v(t)\, \rangle = \sum_{n=1}^{4} c_n\, e^{-i\lambda_n t}\, |\, v_n\, \rangle$$

بم أن الإلكترون عند $t = 0$ كان في الحالة $< 2 |$ فإن

$$|\, 2\, \rangle = |\, v(0)\, \rangle = \sum_{n=1}^{4} c_n\, |\, v_n\, \rangle$$

وبأخذ المجموع من $n = 1$ إلى $n = 4$ وبضرب المعادلة أعلاه في $| \mathrm{v}_1 >$ نحصل علي قيمة c_1 و في $| \mathrm{v}_2 >$ نحصل علي c_2 و ... الخ .

$$< \mathrm{v}_1 \,|\, 2 >= c_1 < \mathrm{v}_1 \,|\, \mathrm{v}_1 > + \mathrm{c}_2 < \mathrm{v}_1 \,|\, \mathrm{v}_2 > + \mathrm{c}_3 < \mathrm{v}_1 \,|\, \mathrm{v}_3 > + \mathrm{c}_4 < \mathrm{v}_1 \,|\, \mathrm{v}_4 >= \mathrm{c}_1$$

$$< \mathrm{v}_2 \,|\, 2 >= c_1 < \mathrm{v}_2 \,|\, \mathrm{v}_1 > + \mathrm{c}_2 < \mathrm{v}_2 \,|\, \mathrm{v}_2 > + \mathrm{c}_3 < \mathrm{v}_2 \,|\, \mathrm{v}_3 > + \mathrm{c}_4 < \mathrm{v}_2 \,|\, \mathrm{v}_4 >= \mathrm{c}_2$$

$$< \mathrm{v}_3 \,|\, 2 >= c_1 < \mathrm{v}_3 \,|\, \mathrm{v}_1 > + \mathrm{c}_2 < \mathrm{v}_3 \,|\, \mathrm{v}_2 > + \mathrm{c}_3 < \mathrm{v}_3 \,|\, \mathrm{v}_3 > + \mathrm{c}_4 < \mathrm{v}_3 \,|\, \mathrm{v}_4 >= \mathrm{c}_3$$

$$< \mathrm{v}_4 \,|\, 2 >= c_1 < \mathrm{v}_4 \,|\, \mathrm{v}_1 > + \mathrm{c}_2 < \mathrm{v}_4 \,|\, \mathrm{v}_2 > + \mathrm{c}_3 < \mathrm{v}_4 \,|\, \mathrm{v}_3 > + \mathrm{c}_4 < \mathrm{v}_4 \,|\, \mathrm{v}_4 >= \mathrm{c}_4$$

والآن بم أن $|\, 2 >= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ فإن $|\, \mathrm{v}_1 >= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$ نجد أن $< \mathrm{v}_1 \,|\, 2 >= 0 = c_1$ وبهذه الطريقة نجد أن $c_2 = 0$ و $c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $c_4 = \frac{-1}{\sqrt{2}}$. إذاً تكون دالة الموجة عند أي لحظة t علي الصورة

$$|\, \mathrm{v}(t) >= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{3}} \left(\exp(i\sqrt{3}\,\Gamma t) \right) |\, \mathrm{v}_3 > - \exp(-i\sqrt{3}\,\Gamma t)\, |\, \mathrm{v}_4 >)$$

$$|\, \mathrm{v}(t) >= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} i\sin(\sqrt{3}\,\Gamma t) \\ \sqrt{3}\cos(\sqrt{3}\,\Gamma t) \\ i\sin(\sqrt{3}\,\Gamma t) \\ i\sin(\sqrt{3}\,\Gamma t) \end{pmatrix}$$

وذلك بإستخدام المعادلة اعلاه والتعويض عن قيم λ المختلفة من المعادلة التي كتبناها سابقاً . والآن يكون إحتمال وجود الإلكترون عند الموقع (الحالة) $|1>$ عند أي لحظة زمنية قادمة t هو

$$P_1(t) = |\langle 1 | v(t) \rangle|^2 = \frac{1}{3}\sin^2(\sqrt{3}\Gamma t)$$

تأكد أن مجموع الإحتمال يساوي الوحدة، أي $P_1 + P_2 + P_3 + P_4 = 1$.

(2) توصف منظومة كمية بالقواعد المكتملة التالية $|1>$ و $|2>$. إذا كان مؤثر هاملتون للنظام هو

$$H = \epsilon\left(-4|1\rangle\langle 1| + 4|2\rangle\langle 2| + 3|1\rangle\langle 2| + 3|2\rangle\langle 1|\right)$$

حيث $\varepsilon > 0$. وإذا كان المؤثر

$$\Lambda = \lambda_0\left(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|\right)$$

(أ) أكتب مصفوفة المؤثرين H و Λ بدلالة القواعد $|1>$ و $|2>$.

(ب) أوجد القيم الذاتية (E_1, E_2 حيث $E_1 < E_2$) والدوال الذاتية المُعّايرة $|E_1>, |E_2>$ للمؤثر H بدلالة القواعد $|1>$ و $|2>$.

(ج) إذا كانت المنظومة في البدء (عند $t = 0$) في الحالة $|2>$، أي $|\psi(0)> = |2>$. إذا قسنا القيمة λ للمؤثر Λ عند اللحظة $t > 0$، فما هي القيم التي سنحصل عليها وما هو إحتمال قياس كل قيمة لـ λ ؟

<u>الحل</u>

(أ) تكتب مصفوفة H علي الصورة العامة

$$H = \begin{pmatrix} <1|H|1> & <1|H|2> \\ <2|H|1> & <2|H|2> \end{pmatrix}$$

حيث

$$<1|H|1> = <1|\varepsilon\left(-4|1><1| + 4|2><2| + 3|1><2| + 3|2><1|\right)|1>$$
$$<1|H|1> = -4\varepsilon$$

و

$$<2|H|1> = <2|\varepsilon\left(-4|1><1| + 4|2><2| + 3|1><2| + 3|2><1|\right)|1>$$
$$<2|H|1> = 3\varepsilon$$

و

$$<1|H|2>=<1|\varepsilon\left(-4|1><1|+4|2><2|+3|1><2|+3|2><1|\right)|2>$$
$$<1|H|2>=3\varepsilon$$

و

$$<2|H|2>=<2|\varepsilon\left(-4|1><1|+4|2><2|+3|1><2|+3|2><1|\right)|2>$$
$$<2|H|2>=4\varepsilon$$

حيث نعلم أن القواعد المكتملة تحقق الشرطين

$<1|2>=<2|1>=0$ و $<1|1>=<2|2>=1$.

وبالتعويض في المصفوفة أعلاه نجد أن

$$H=\begin{pmatrix}-4\varepsilon & 3\varepsilon\\ 3\varepsilon & 4\varepsilon\end{pmatrix}=\varepsilon\begin{pmatrix}-4 & 3\\ 3 & 4\end{pmatrix}$$

ونكتب كذلك مصفوفة Λ في الصورة العامة

$$\Lambda=\begin{pmatrix}<1|\Lambda|1> & <1|\Lambda|2>\\ <2|\Lambda|1> & <2|\Lambda|2>\end{pmatrix}$$

نجد أن

$$<1|\Lambda|1>=<1|\lambda_0\left(|1><2|+|2><1|\right)|1>$$
$$<1|\Lambda|1>=0$$

و

$$<1|\Lambda|2>=<1|\lambda_0\left(|1><2|+|2><1|\right)|2>$$
$$<1|\Lambda|2>=\lambda_0$$

و

$$<2|\Lambda|1>=<2|\lambda_0\left(|1><2|+|2><1|\right)|1>$$
$$<2|\Lambda|1>=\lambda_0$$

و

$$<2|\Lambda|2>=<2|\lambda_0\left(|1><2|+|2><1|\right)|2>$$
$$<2|\Lambda|2>=0$$

حيث نعلم أن القواعد المكتملة تحقق الشرطين

$<1|2>=<2|1>=0$ و $<1|1>=<1|1>=1$.

والآن تصبح مصفوفة Λ علي الصورة

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 0 & \lambda_0 \\ \lambda_0 & 0 \end{pmatrix}$$

(ب) تُعطى القيم الذاتية لـ H من المعادلة المميزة $|H - EI| = 0$ التي نحصل منها علي $E_1 = 5\varepsilon$ و $E_2 = -5\varepsilon$ والدوال الذاتية المناظرة هي

$|E_1> = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$ و $|E_2> = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} -3 \\ 1 \end{pmatrix}$.

وبدلالة القواعد $|1>, |2>$ التي يمكن كتابتها في الصورة

$$|1> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad |2> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

تصبح $|E_1>, |E_2>$ في الصورة

$$|E_1> = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{3}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10}}|1> + \frac{3}{\sqrt{10}}|2>$$

و

$$|E_2> = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} -3 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{-3}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{-3}{\sqrt{10}}|1> + \frac{1}{\sqrt{10}}|2>$$

ونلاحظ أن $<E_1|E_2> = <E_2|E_1> = 0$ و أن $<E_1|E_1> = <E_2|E_2> = 1$.

(ج) نحصل على القيم الذاتية للمصفوفة Λ من المعادلة المميزة $|\Lambda - \lambda I| = 0$ وهي $\lambda_1 = \lambda_0$ و $\lambda_2 = -\lambda_0$ ومن ثم تكون الدوال الذاتية هي

$$|\Lambda_1> = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \text{و} \qquad |\Lambda_2> = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

علي الترتيب. ونجد أن الدالة الذاتية عند أي لحظة t تُعطى بـ

$$|\psi(t)> = C_1 \exp(-\frac{iE_1}{\hbar})|E_1> + C_2 \exp(-\frac{iE_2}{\hbar})|E_2>$$

ولكن نعلم أن $|\psi(0)> = |2>$ وهذا يعني أن $C_1 = \frac{1}{\sqrt{10}}, C_2 = \frac{3}{\sqrt{10}}$. وتصبح الدالة في الصورة

$$|\psi(t)> = \frac{1}{\sqrt{10}} \exp(-\frac{iE_1}{\hbar})|E_1> + \frac{3}{\sqrt{10}} \exp(-\frac{iE_2}{\hbar})|E_2>$$

ويكـــون إحتمـــال الحصـــول علـــي قيمـــة λ_1 عنـــد أي لحظـــة t هـــو $P_1(t)=|<\Lambda_1|\psi(t)>|^2$. وبـــالتعويض عـــن $<\Lambda_1|=\frac{1}{\sqrt{2}}(1\quad 1)$ نحصـــل علـــي $P_1(t)=0.2$. وبالمثل نجد أن $P_2(t)=|<\Lambda_2|\psi(t)>|^2$ التي تُعطى $P_2(t)=$.

(3) لمنظومة مؤثر A لا يتبادل مع مؤثر هاملتون. إذا كانت القيمتان الذاتيتان له هي a_1 و a_2 والدالتان المناظرتان هما

$$|\varphi_1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_1>+|u_2>\right)$$

$$|\varphi_2>=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|u_1>-|u_2>\right)$$

حيث $|u_1>$ و $|u_2>$ هما الدالتان الذاتيتان لمؤثر هاملتون اللتان تقابلان الطاقتين E_1 و E_2 علي الترتيب. إذا كانت المنظومة في البدء في الحالة $|\varphi_1>$، أثبت أن القيمة المتوسطة للمؤثر A عند أي لحظة زمنية t يُعطى بـ

$$<A>=\frac{a_1+a_2}{2}+\frac{a_1-a_2}{2}\cos(\frac{E_1-E_2}{\hbar}t)$$

<u>الحل</u>

إذا كانت المنظومة في البدء في الحالة $|\varphi_1>$ فإن الحالة عند أي لحظة t هي

$$|\psi(t)>=\sum_n \exp(-\frac{iE_nt}{\hbar})|\psi(0)>$$

وبم أن $|\psi(0)>=|\varphi_1>$ فإن

$$|\psi(t)>=\frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-\frac{iE_1t}{\hbar})|u_1>+\frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-\frac{iE_2t}{\hbar})|u_2>$$

وبوضع $\omega_1=\frac{E_1}{\hbar}$ و $\omega_2=\frac{E_2}{\hbar}$ تصبح المعادلة أعلاه في الصورة

$$|\psi(t)>=\frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-i\omega_1\ t)|u_1>+\frac{1}{\sqrt{2}}\exp(-i\omega_2\ t)|u_2>$$

والتي يمكن كتابتها على الصورة

$$|\psi(t)>=\frac{c_1}{\sqrt{2}}\left(|u_1>+|u_2>\right)+\frac{c_2}{\sqrt{2}}\left(|u_1>-|u_2>\right)$$

بحيث أن

$$c_1 + c_2 = \exp(-i\omega_1 t)$$
$$c_1 - c_2 = \exp(-i\omega_2 t)$$

وبحلهما نجد أن

$$c_1 = \frac{1}{2}\left(\exp(-i\omega_1 t) + \exp(-i\omega_2 t)\right)$$
$$c_2 = \frac{1}{2}\left(\exp(-i\omega_1 t) - \exp(-i\omega_2 t)\right)$$

أو

$$c_1 = \frac{1}{2}\left(\cos\omega_1 t - i\sin\omega_1 t\right) + \left(\cos\omega_2 t - i\sin\omega_2 t\right)$$
$$c_1 = \frac{1}{2}\left((\cos\omega_1 t + \cos\omega_2 t) - i(\sin\omega_1 t + \sin\omega_2 t\right)$$

و

$$|c_1|^2 = \frac{1}{4}\left((\cos\omega_1 t + \cos\omega_2 t)^2 + (\sin\omega_1 t + \sin\omega_2 t\right)^2$$
$$|c_1|^2 = \frac{1}{4}[\cos^2\omega_1 t + \cos^2\omega_2 t + 2\cos\omega_1 t\cos\omega_2 t +$$
$$+\sin^2\omega_1 t + \sin^2\omega_2 t + 2\sin\omega_1 t\,\sin\omega_2 t]$$

أو

$$|c_1|^2 = \frac{1}{4}[2 + 2(\cos\omega_1 t\cos\omega_2 t + \sin\omega_1 t\,\sin\omega_2 t)] = \frac{1}{2}[1 + \cos(\omega_1 - \omega_2)t]$$

وبالمثل نجد أن

$$|c_2|^2 = \frac{1}{4}[2 + 2(\cos\omega_1 t\cos\omega_2 t - \sin\omega_1 t\,\sin\omega_2 t)] = \frac{1}{2}[1 - \cos(\omega_1 - \omega_2)t]$$

حيث نجد من حساب المثلثات أن $\cos A\cos B \pm \sin A\sin B = \cos(A \mp B)$.

لإيجاد متوسط A في الحالة $|\psi(t)>$ نكتب

$$<A> = <\psi(t)|A|\psi(t)>$$

ولكن بم أن A لا يتبادل مع مؤثر هاملتون فإن الدوال $|u_1>$ و $|u_2>$ هي ليست دوال ذاتية للمؤثر A. ويعني هذا أن تأثير A علي هذه الدوال غير معروف. ولذلك نكتب $|\psi(t)>$ بدلالة الدوال الذاتية للمؤثر A، وذلك علي الصورة

$$|\psi(t)>=c_1|\varphi_1>+c_2|\varphi_2>$$

ويكون متوسط A هو

$$<\psi(t)|A|\psi(t)>=|c_1|^2<\varphi_1 A|\varphi_1>+|c_2|^2<\varphi_2|A|\varphi_2>$$

وبم أن

$$A|\varphi_1>=a_1|\varphi_1>$$
$$A|\varphi_2>=a_2|\varphi_2>$$

نجد أن

$$<A>=|c_1|^2\ a_1+a_2\ |c_2|^2>$$

وبالتعويض عن $|c_1|^2$ و $|c_2|^2$ من المعادلتين السابقتين، نجد أن

$$<A>=\frac{1}{2}[1+\cos(\omega_1-\omega_2)t]a_1+\frac{1}{2}[1-\cos(\omega_1-\omega_2)t]a_2$$

والذي يأخذ الصورة

$$<A>=\frac{a_1+a_2}{2}+\frac{a_1-a_2}{2}\cos(\omega_1-\omega_2)t$$

أو

$$<A>=\frac{a_1+a_2}{2}+\frac{a_1-a_2}{2}\cos(\frac{E_1-E_2}{\hbar})t$$

(4) إذا كان المؤثر O هو حاصل جمع مؤثرات كمية الحركة الزاوية الغزلية وذلك على الصورة

$$O=S_x+S_y+S_z$$

(أ) إذا قيس O وحصلنا علي الحالة $|\alpha>$ التي لها اكبر قيمة ذاتية، ما هي الإحتمالات والإمكانيات الناتجة لقياس S_z مباشرة ؟

(ب) أوجد الإتجاه n الذي يُعطى فيه قياس S بالتأكيد القيمة S_n.

الحل

$$O = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & -1 \end{pmatrix}$$

(أ) القيمتان الذاتيتان هما $\pm\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ والدوال الذاتية لهما

$$|+>= \frac{1}{\sqrt{6+2\sqrt{3}}}\begin{pmatrix} 1-i \\ -1-\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

$$|->= \frac{1}{\sqrt{6-2\sqrt{3}}}\begin{pmatrix} 1-i \\ -1+\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

والآن نجـد أن $|\alpha>=|+>$ وبـم أن الـدوال الذاتيـة والقـيم الذاتيـة لــ S_z هـمـا $|\chi_1>= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ و $|\chi_2>= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ بـالقيم الذاتيـة $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ علــي الترتيـب.

فيكون إحتمال الحصـول علـي القيمـة $\frac{\hbar}{2}$ هو $P_1 = |<\chi_1|+>|^2 = \frac{1}{3-\sqrt{3}}$ وإحتمـال الحصول علي القيمة $-\frac{\hbar}{2}$ هو $P_2 = |<\chi_2|+>|^2 = \frac{3-\sqrt{3}}{6}$.

(ب) نفرض أن الدوال الذاتية لـ S_n هما $|+_n>$ و $|-_n>$. ونريد الآن أن نحصـل علي $S_n = \frac{\hbar}{2}$ بالتأكيد إذا قسنا S، ولكن يتطلب هذا أن يكون $|<+_n|+>|^2 = 1$ أو $|<-_n|+>|^2 = 1$. والفرصة الوحيدة المتاحة هي أن تتناسب كل من $|+_n>$ و $|-_n>$ مع $|+>$. إذاً

$$S_n = \alpha\, O = \alpha(S_x + S_y + S_z)$$

أو

$$S_n = \alpha(S_x + S_y + S_z) = (1,1,1)\cdot\vec{S}$$

وبالتالي فإن $\hat{n} = \frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)$ أو $\hat{n} = -\frac{1}{\sqrt{3}}(1,1,1)$.

(5) توصف منظومة بمؤثرين هيرميتيين غير متبادلين هما A و B. للمؤثر A قيمتـان ذاتيتـان مختلفتـان همـا a_1 و a_2، أي $A|\varphi_i>= a_i|\varphi_i>$ حيـث $i = 1, 2$.

وللمــؤثر B القيمتـــان الـــذاتيتان المختلفتـــان b_1 و b_2 والـــدالتان الـــذاتيتان $B|\Theta_i>=b_i|\Theta_i>$ حيث $i=1,2$. يُمكن كتابة الحالة $|\varphi_1>$ علي الصورة

$$|\varphi_1>=c_1|\Theta_1>+c_2|\Theta_2>$$

(أ) أوجد الدالة $|\varphi_2>$ بدلالة $|\Theta_1>,|\Theta_2>$ علماً بأن الدالتين متعامدتين.

(ب) إذا كانت منظومة ما في الحالة العامة

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}|\varphi_1>+\sqrt{\frac{5}{6}}|\varphi_2>$$

أحسب إحتمالات الحصول علي a_1 و a_2 عند قياس A. إذا قيست B مباشرة بعد قياس A، فما هو إحتمال الحصول علي b_1 ؟

(ج) إذا لم يتم قياس A، فما هو إحتمال أن يُعطى قياس B القيمة b_1 ؟

<u>الحل</u>

بم أن B مؤثر هيرميتي يمكن كتابة الدوال الذاتية لـ A بدلالة الدوال الذاتية لـ B، أي $|\varphi_1>=c_1|\Theta_1>+c_2|\Theta_2>$ و $|\varphi_2>=c_3|\Theta_1>+c_4|\Theta_2>$

ونحصــــل مــــن شــــرط التعامــد $<\varphi_1|\varphi_2>=0$ ومــــن شــــرط المُعّــــايرة $<\varphi_1|\varphi_1>=<\varphi_2|\varphi_2>=1$ علي أن $c_3=-c_2^*$ و $c_4=c_1^*$. وتكون

$$|\varphi_2>=-c_2^*|\Theta_1>+c_1^*|\Theta_2>$$

(أ) يُعطـى إحتمـال الحصـول علـي a_1 عنـد قيـاس A فـي الحالـة $|\psi>$ بالمقدار $P_1=|c_1|^2=\frac{1}{6}$ و يُعطـى إحتمـال الحصـول علـي a_2 عنـد قيـاس A بالمقـدار $P_2=|c_2|^2=\frac{5}{6}$. فـإذا قسنا A وحصلنا علـي القيمـة a_1 فـإن المنظومـة تكون فـي الحالـة $|\varphi_1>$. ويكـون إحتمـال الحصـول علـي b_1 إذا قسنا B مباشـرة هـو $|c_1|^2$ وإحتمال الحصول علي b_2 هو $|c_2|^2$.

(ب) أما إذا حصلنا علي القيمة a_2 عند قياس A في الحالة $|\psi>$ فـإن المنظومـة تكون في الحالـة $|\varphi_2>$ بعد عملية القياس مباشرة. فيكون إحتمال أن يُعطى قياس B مباشرة القيمة b_1 هو $|c_2|^2$ و إحتمـال أن يُعطـى القيـاس القيمـة b_2 هـو $|c_1|^2$.

ويكون الإحتمال الكلي أن يُعطى قياس B مرة أخرى القيمة a_1 بغض النظر عن ناتج قياس A هو $P(b_2)=\frac{1}{6}|c_1|^2+\frac{5}{6}|c_2|^2$.

الجدير بالذكر، أنّه إذا قيست B مباشرة في الحالة $|\psi>$ فإننا نكتب $|\psi>$ علي الصورة

$$|\psi>=\left(\sqrt{\frac{1}{6}}\,c_1-\sqrt{\frac{5}{6}}\,c_2^*\right)|\Theta_1>+\left(\sqrt{\frac{5}{6}}\,c_2+\sqrt{\frac{1}{6}}\,c_1^*\right)|\Theta_2>$$

ويكون إحتمال الحصول علي b_1 هو

$$P(b_1)=\left|\sqrt{\frac{1}{6}}\,C_1-\sqrt{\frac{5}{6}}\,C_2^*\right|^2$$

وإحتمال الحصول علي b_2 هو

$$P(b_2)=\left|\sqrt{\frac{5}{6}}\,c_2+\sqrt{\frac{1}{6}}\,c_1^*\right|^2$$

ونلاحظ أن إحتمال الحصول علي b_1 و b_2 مباشرة يختلف عن إحتمال الحصول عليه بعد قياس كمية أخرى. ويعني هذا أن قياس A جعل المنظومة مضطربة.

(6) منظومة لها المؤثر A الذي له القيمتان الذاتيتان a_1 و a_2 والدالتان المناظرتان لهما $|\varphi_1>$ و $|\varphi_2>$ علي الترتيب. إذا كان المؤثر B له القيمتان الذاتيتان b_1 و b_2 والدالتان المناظرتان لهما $|\chi_1>$ و $|\chi_2>$ علي الترتيب. وترتبط هذه الدوال الذاتية بالعلاقتين التاليتين

$$|\varphi_1>=\frac{1}{\sqrt{13}}\left(2|\chi_1>+3|\chi_2>\right)$$

$$|\varphi_2>=\frac{1}{\sqrt{13}}\left(3|\chi_1>-2|\chi_2>\right)$$

إذا قسنا A وحصلنا علي القيمة a_1، وإذا قسنا B و A مرة أخرى، أثبت أن إحتمال الحصول علي a_1 في المرة الثانية يساوي $\frac{97}{169}$.

الحل

إذا قسنا A وحصلنا علي القيمة a_1 يعني هذا أن الحالة بعد عملية القياس هي $|\varphi_1>$ فإذا قسنا B بعدئذٍ فإن الناتج هيو الحالة الجديدة $(B|\varphi_1>)$. فإذا قسنا A مرة أخرى سنحصل علي الحالة $A(B|\varphi_1>)$ ومنها يكون إحتمال الحصول علي القيمة a_1 مرة أخرى هو $|<\varphi_1|A(B|\varphi_1>)|^2$ والذي يُعطى المقدار $\frac{97}{169}$.

تمرين عام:

(1) إذا كانت مؤثرات كمية الحركة الزاوية الغزلية في الإتجاهات الثلاثة هي

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ و } S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ و } S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(أ) أوجد القيم الذاتية والدوال الذاتية لكل مؤثر، ثم اكتب الدوال الذاتية بدلالة القواعد الأساسية $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |+>$ و $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |->$.

(ب) إذا كان جسيم في الحالة التي فيها $S_y = \frac{\hbar}{2}$، أوجد إحتمالات قياس S_z في هذه الحالة.

(ج) إذا وُضع الجسيم في مجال مغناطيسي بحيث كان مؤثر هاملتون له هو $H = \frac{eB}{mc} S_z$، و كان الجسيم عند اللحظة $t = 0$ موجودا في الحالة التي لها $S_y = -\frac{\hbar}{2}$، فأوجد هذه الحالة عند أي لحظة زمنية t.

(د) إذا قسنا S_y عند اللحظة $t = t_1$، فما هي إحتمالات النواتج؟ إذا قسنا S_z عند اللحظة $t = t_1$، فما هي إحتمالات النواتج؟

(هـ) أوجد متوسط القيم الذاتية لكل من S_x و S_y و S_z عند اللحظة $t = t_1$.

الإجابة: (ج) $|\psi(t)>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i\exp(-i\varepsilon t) \\ \exp(i\varepsilon t)\end{pmatrix}$ حيث $\varepsilon=\frac{eB}{2mc}$.

(د) إحتمال الحصول علي $S_y=\frac{\hbar}{2}$ هو $P_+=\sin^2\varepsilon t_1$ والحصول علي $S_y=-\frac{\hbar}{2}$ هــو $P_+=\cos^2\varepsilon t_1$ وإحتمــال الحصــول علــي $S_z=\frac{\hbar}{2}$ هــو $\frac{1}{2}$ وإحتمــال الحصول علي $S_z=-\frac{\hbar}{2}$ هو $\frac{1}{2}$.

(هـ) $<S_x>=\frac{\hbar}{2}\sin 2\varepsilon t_1$ و $<S_y>=-\frac{\hbar}{2}\cos 2\varepsilon t_1$ و $<S_y>=0$.

(2) (أ) أوجد الدوال الذاتية للمؤثرات التالية ومن ثم وضح أي الدوال متعامدة

$$B=\begin{pmatrix} 2 & 3+i \\ 3-i & 1\end{pmatrix} \text{ و } C=\begin{pmatrix} 2 & i \\ 2-i & 1\end{pmatrix} \text{ و } D=\begin{pmatrix} 2 & i \\ -i & 1\end{pmatrix}$$

(ب) أي المؤثرات أعلاه هيرميتية.

(3) إذا كــان $|1>=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1\end{pmatrix}$ و $|2>=\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0\end{pmatrix}$ و $|3>=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1\end{pmatrix}$ كــوِّن ثلاثــة متجهــات متعامدة من هذه المتجهات بإستخدام قاعدة جرام-إشمت.

(4) أثبت أن الدوال الذاتية للمؤثر

$$\Omega=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

هي: $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1\end{pmatrix}$ و $\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1\end{pmatrix}$ و $\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 0\end{pmatrix}$.

ومن ثم إستخدم قاعدة جرام - إشمت لإيجاد ثلاث دوال متعامدة مع بعضها البعض. أوجد القيم الذاتية و الدوال الذاتية له.

(5) أوجد القيم الذاتية والدوال الذاتية للمؤثر $\Omega = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}$.

(i) هل المؤثر Ω هيرميتي؟ **(ii)** هل القواعد له متعامدة ؟

(6) خذ المؤثر الهيرميتى $J = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$.

(i) وضِّح أن القيم الذاتية للمؤثر أعلاه هي: $\lambda = 1, 1, 2$.

(ii) وضِّح أن المتجه الذاتي $|\lambda = 2>$ يمكن أن يكتب في صورة $\frac{}{\sqrt{2a^2}}\begin{bmatrix} 0 \\ -a \\ a \end{bmatrix}$ والمتجه الآخر في صورة $\frac{1}{\sqrt{b^2 + 2c^2}}\begin{bmatrix} b \\ c \\ c \end{bmatrix} = |\lambda = 1>$.

(7) خذ المصفوفة (المؤثر) $F = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$

(أ) أثبت أنها تحقق المعادلة $FF^+ = F^+F = I$.

(ب) بيّن أن قيمها الذاتية هي $\lambda = e^{i\theta}$ و $\lambda = e^{-i\theta}$.

(ج) أوجد المتجهات الذاتية المقابلة لكل قيمة ذاتية أعلاه.

(8) إذا كان $L_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, L_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 1 \end{pmatrix}, L_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

(أ) ما هي القيم الممكنة التي نحصل عليها إذا قسنا L_z ؟

(ب) أوجد الدوال الذاتية المُعّايرة وكذلك القيم الذاتية لـ L_x في قواعد L_z.

(ج) إذا كان الجسيم في الحالة $|L_z = -1>$ وتم قياس L_x ما هي النتائج الممكنة ؟ وما هي إحتمالاتها ؟

(د) خـذ الحالـة $|\psi>=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$ فـي قواعـد L_z. إذا قسـنا L_z^2 فـي هـذه الحالـة وتحصلنا على النتيجة1، ما هي الحالة للجسيم بعد عملية القياس؟ وما هو إحتمال الحصول علي هذه النتيجة؟ إذا قيس L_z، ما هي النتائج المتحصل عليها وما هي إحتمالاتها ؟

(9) إذا كان لدينا في قواعد ما المصفوفات (المؤثرات) التالية

$$A=\alpha\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&2\end{pmatrix},\qquad B=\hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&0\end{pmatrix},\qquad C=\gamma\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&2\end{pmatrix}$$

حيث $\alpha\,,\gamma$. إذا كانـت المنظومـة في البـدء في الحالـة $\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$ عنـدما قـيس C الذي كان قيمته $-\gamma$.

(أ) أوجد إحتمال الحصول علي هذه النتيجة والحالة الناتجة.

(ب) أوجد القيم الممكنة الحصول إذا قسنا A مباشرة بعد قياس C.

(10) إذا كان

$$J_{\pm}=\hbar a_{\pm}^{\dagger}a_{\mp}\,,\qquad J_z=\frac{\hbar}{2}\left(a_{+}^{\dagger}a_{+}-a_{-}^{\dagger}a_{-}\right)\,,\qquad N=a_{+}^{\dagger}a_{+}+a_{-}^{\dagger}a_{-}$$

حيث $a_{\pm}$ و $a_{\pm}^{+}$ هما مؤثري الرفع والخفض لمهتزين توافقيين علي التوالي ويحققان قوس التبادل $[a_{\pm},a_{\pm}^{+}]=1$. أثبت أن

$$[J_z,J_{\pm}]=\pm\hbar J_{\pm}\,,\qquad [\boldsymbol{J}^2,J_z]=0\,,\qquad \boldsymbol{J}^2=\left(\frac{\hbar^2}{2}\right)N\left[\frac{N}{2}+1\right]$$

(11) إذا كان للمهتز التوافقي

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a-a^{+})\ \text{ و }\ p=i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,(a^{+}-a)\ ،$$

مستخدماً معادلة هايزنبرج لحركة المؤثر $\hat{x}$ و $\hat{p}$ ، أثبت أن:

(أ) موضع الجسيم للمهتز عند أي لحظة t يُعطى بـ

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0)\cos\omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega}\sin\omega t$$

(ب) متوسط القيمة $C(t) = < x(t)x(0) >$ يساوي $C(t) = \frac{\hbar}{2m\omega}\exp(-i\,\omega t)$.

(ج) إذا كـان المهتـز فـي البـدء فـي الحالـة العامـة $|\psi> = \frac{1}{\sqrt{2}}|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}|1>$ ، فأوجد دالة الحالة للمهتز عند أي لحظة زمنية t .

(د) أثبت أن الخطأ في قياس موقع المهتز يُعطى بـ $\Delta x(t) = \frac{\hbar}{m\omega}(1 - \frac{\cos^2\omega t}{2})$

والخطأ في قياس كمية حركة المهتز يُعطى بـ $\Delta p(t) = m\hbar\omega(1 - \frac{\sin^2\omega t}{2})$.

(هـ) إذا كان $a|\lambda> = \lambda|\lambda>$ و $\lambda = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n>$ فأثبت أن $f(n) = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n}} f(0)$.

(12) إذا كـان مـؤثر هـاملتون لمنظومـة هـو $H = E_1|1><1| + E_2|2><2|$ أو علي الشكل المصفوفي التالي

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & \frac{\hbar\omega}{2} \\ \frac{\hbar\omega}{2} & E_2 \end{pmatrix}$$

(أ) أثبت أن القيم الذاتية للطاقة هي $E = E_1 \pm \hbar\omega$ إذا كان $E_1 = E_2$.

(ب) أثبت أن الدالتين الذاتيتين هما $|E_+> = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ و $|E_-> = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

(ج) أكتب الدالتين أعلاه بدلالة القواعد $|1> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $|2> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

(د) أوجد دالة الموجة لهذه المنظومة عند أي لحظة زمنية t ، أي $|\psi(t)>$.

(هـ) أوجد إحتمال وجود الجسيم بطاقة E_+ .

(13) توصف منظومة بمؤثر هاملتون التالي

$$H = \hbar\omega\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

و بمؤثرين $A = \begin{pmatrix} 0 & \lambda & 0 \\ \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\lambda \end{pmatrix}$ و $B = \begin{pmatrix} 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu \\ 0 & \mu & 0 \end{pmatrix}$.

(أ) أوجد القيم الذاتية للمؤثرين A, B.

(ب) إذا كانت المنظومة في الحالة

$$|\phi> = c_1|\varphi_1> + c_2|\varphi_2> + c_3|\varphi_3>$$

حيث $|\varphi_1> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $|\varphi_2> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ و $|\varphi_3> = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. أوجد:

(i) العلاقة بين الثوابت c_1, c_2, c_3 بحيث تكون $|\phi>$ دالة عيارية.

(ii) قيمة متوسط المؤثرين A و B.

(iii) قيمة طاقة الحالة $|\phi>$.

(14) أوجد مصفوفة المؤثرين x و p_x للمهتز التوافقي البسيط في تمثيل شرودنجر وفى تمثيل هايزنبرج (خذ $t_0 = 0$).

(15) إذا كانت E_n و $|\psi_n>$ هما القيم الذاتية للطاقة ودالة الحالة لمنظومة. إذا كانت المنظومة في البدء في الحالة

$$|\psi(0)> = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha_1}|\psi_1> + \frac{1}{\sqrt{3}}e^{i\alpha_2}|\psi_2> + \frac{1}{\sqrt{6}}e^{i\alpha_3}|\psi_3>$$

حيث $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ ثوابت.

(أ) أوجد دالة حالة المنظومة عند أي لحظة t.

(ب) أوجد إحتمال أن يُعطى قياس الطاقة للمنظومة عند أي لحظة t القيمة E_2.

(ج) هل يتغير متوسط موقع المنظومة وكمية حركتها وطاقتها مع الزمن ؟

(16) تُعطـــى دالـــة حالـــة جســـيم داخـــل بئـــر لانهائيـــة عرضـــها a بـــ $|\psi_n>=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ وطاقتها $E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}$. إذا كـان الجسيم فـي البـدء فـي الحالة

$$|\psi(0)>=\frac{1}{\sqrt{3}}|\psi_1>+\sqrt{\frac{2}{3}}|\psi_2>$$

(أ) أوجد دالة الحالة للجسيم عند أي لحظة t.

(ب) أوجد متوسط طاقة الجسيم عند أي لحظة t.

(ت) أوجد إحتمال أن يُعطى قياس الطاقة (i) القيمـة E_1 (ii) القيمـة E_2 (iii) القيمة E_3.

(ث) أوجد متوسط كمية حركة الجسيم في البدء، وهل تتغير كميـة حركـة الجسيم مع الزمن؟

(17) إذا كان مؤثر الغزل (**Spin**) لجسيم في الإتجاه n هو

$$S_n=\begin{pmatrix}\cos\theta & e^{-i\varphi}\sin\theta\\ e^{i\varphi}\sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

حيث θ,φ زوايا قطبية.

(أ) أوجد القيم الذاتية والدوال الذاتية لهذا المؤثر.

(ب) اكتب دالة الحالة العامة في الصورة $|\psi>=c_1|\psi_1>+c_2|\psi_2>$.

(ج) أوجـد متوسـط الغـزل فـي إتجـاه x,y,z أي S_x و S_y و S_z فـي كـل مـن الحالتين $|\psi_1>$ و $|\psi_2>$.

(د) أوجد إحتمال الحصول علي الحالة $|\psi_1>$ في الحالة العامة في (ب).

(18) يوجـد جسـيم فـي الحالـة $|\chi>=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}2+i\\ i\end{pmatrix}$. إذا كـان $S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ و $S_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$.

(أ) أوجد إحتمال قياس S_z في الحالة $|\chi>$ لنحصل علي (i) $\frac{\hbar}{2}$ (ii) $-\frac{\hbar}{2}$.

(ب) أوجد متوسط القيمة S_z في الحالة $|\chi>$. (الإجابة: $\frac{\hbar}{18}$)

(ج) أوجد إحتمال قياس S_x في الحالة $|\chi>$ لنحصل علي (i) $\frac{\hbar}{2}$ (ii) $-\frac{\hbar}{2}$.

(د) أوجد متوسط القيمة S_x في الحالة $|\chi>$. (الإجابة: $\frac{4\hbar}{9}$)

(19) إذا كان مؤثر هاملتون لمهتز توافقي يُعطى بـ

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

أثبت أن

$$\frac{d(x^2)_H}{dt}=\frac{d(x_H)^2}{dt}=2x_H\frac{dx_H}{dt}+\frac{\hbar}{mi}$$

و أن

$$\frac{d\left(E_k\right)_H}{dt}=\frac{p_HF_H}{m}+\frac{1}{2m}[F_H,p_H]$$

حيث $(E_k)_H$ هي مؤثر طاقة حركة الجسيم في تمثيل هايزنبرج.

(20) إذا كانت القيم الذاتية للمؤثر D للدوال الذاتية المتعامدة والمُعّايرة $|1>$ و $|-1>$ و $|2>$ هي 1 و -1 و 2 علي الترتيب. أوجد متوسط المؤثر D في الحالة العامة التالية

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}|-1>+\frac{1}{\sqrt{2}}|1>+\frac{1}{\sqrt{3}}|2>$$

الإجابة: $(<\psi|D|\psi>=1)$.

(21) أوجد متوسط طاقة المهتز التوافقي في الحالة العامة

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{14}}|1>-\frac{2}{\sqrt{14}}|2>+\frac{1}{\sqrt{14}}|3>$$

حيث $H|n>=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega|n>$. (الإجابة: $(\frac{43}{14}\hbar\omega)$).

(22) إذا كانـت الدالـة الذاتيـة لجسـيم فـي بئـر لانهائيـة عرضـها a هـي $|\psi_n>=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ وطاقتـه هـي $E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$ ، حيـث $n=1,2,3,\cdots$. إذا كان الجسيم في البدء ($t=0$) في الحالة العامة

$$|\psi(0)>=\frac{1}{\sqrt{14}}\left(|\psi_1>+2|\psi_2>+3|\psi_3>\right)$$

(أ) أوجد دالة حالة الجسيم عند أي لحظة زمنية t.

(ب) أوجـد القـيم المتحصـل عليهـا إذا قسـنا طاقـة الجسـيم فـي الحالـة ($|\psi(0)>$) أعلاه.

(الإجابة: $14E_1$)

(23) يوجد إلكترون في الحالة

$$|\chi>=\frac{1}{3}|1>+\frac{2\sqrt{2}}{3}|2>$$

حيث $|1>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ و $|2>=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

(أ) ما هو إحتمال الحصول علي القيمة $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ إذا قسنا S_z في الحالـة أعـلاه ؟

(الإجابة: $\frac{1}{9}$ و $\frac{8}{9}$).

(ب) ما هو متوسط S_z في الحالة أعلاه ؟ (الإجابة: $-\frac{7}{18}\hbar$).

(ج) أوجد مقدار الخطأ في قياس S_z في الحالة أعلاه؟ (الإجابة: $\frac{2\sqrt{2}}{9}\hbar$).

(24) أثبت أن عناصر المصفوفة A لا تتغير في تمثيل هايزنبرج، أي أثبت أن

$$<\psi_H|A_H|\psi_H>=<\psi_S|A_S|\psi_S>$$

وكذلك أن الإحتمال لا يتغير بتمثيل هايزنبرج، أي $<\psi_S|\psi_S>=<\psi_H|\psi_H>$.

الفصل الثاني

المهتز التوافقي البسيط

Simple Harmonic Oscillator

تمهيد

تُمثل الحركة التوافقية البسيطة نموذجا لكثير من الظواهر الفيزيائية. ومن هذه الظواهر حركة البندول البسيط وحركة الذرات داخل النسيج البلوري في المواد. ولهذا السبب يودي فهم هذه الحركة الي معرفة الكثير عن طبيعة المواد وسلوكها.

لقد درسنا في ما سبق حل معادلة شرودنجر للمهتز التوافقي البسيط بواسطة تمثيل شرودنجر حيث حصلنا علي دالة الموجة للحالة $\psi_n(x)$ بدلالة دالة هيرمايت $H_n(x)$ علي الصورة

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{m\omega/\hbar}\,x\right)e^{-m\omega x^2/2\hbar} \qquad (2.1)$$

والتي تحقق معادلة شرودنجر

$$H\psi_n = E_n\psi \qquad (2.2)$$

حيث H هو مؤثر هاملتون والذي يكتب على الصورة

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad (2.3)$$

و

$$n = 0\,,1\,,2\,,\cdots \qquad E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (2.4)$$

حيث يُعرف n بعدد الكم الرئيسي. وتُعرف طريقة الحل أعلاه بتمثيل دالة الموجة بدلالة الموقع أو تمثيل شرودنجر.

الجدير بالذكر أن تقريب وضع المهتز التوافقي يكون صالحاً بالقرب من نقطة النهاية الصغرى ($x = x^*$) لدالة أي جهد $V(x)$. ويتضح هذا إذا كتبنا الدالة $V(x)$ بدلالة متسلسلة تايلور وذلك علي الصورة

(2.5)

$$V(x) = V_0 + (x - x^*)\frac{\partial V}{\partial x}|_{x=x^*} + \frac{1}{2}(x - x^*)^2\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}|_{x=x^*} + \cdots$$

حيث V_0 ثابت و $\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=x^*} = 0$ عند النهاية الصغرى.

2.1 دالة الموجة للمهتز التوافقي باستخدام المؤثرات

لقد تمكن العالم Dirac من اكتشاف طريقة ذكية لكتابة دالة الموجة بدلالة (قواعد) الطاقة. تعتمد هذه الطريقة علي كتابة دالة الحالة في صورة متجه. واستخدام عملية الضرب الداخلي باستخدام القوس (Bracket) $<\cdots|\cdots>$.
وكل ما يلزمنا لحل معادلة شرودنجر في هذه الحالة هو معرفة واستعمال المؤثرين الرافع والخافض واستخدام قوس التبادل بين مؤثر الموقع $\hat{X}$ وكمية الحركة $\hat{P}$ اللذان يحققان العلاقة $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$.
ويُعّرف المؤثر الخافض والرافع علي التوالي بالمعادلتين

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\,\hat{P} \qquad (2.6)$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\,\hat{P} \qquad (2.7)$$

ومن المعادلتين أعلاه يصبح مؤثر الموقع وكمية الحركة علي النحو التالي

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a + a^+\right) \qquad (2.8)$$

$$\hat{P} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(a - a^+\right) \qquad (2.9)$$

منها نجد أن

$$\hat{X}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(a^2 + aa^+ + a^+a + a^{+2}\right) \qquad (2.10)$$

$$\hat{P}^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2}\left(a^2 - aa^+ - a^+a + a^{+2}\right) \qquad (2.11)$$

وبدلالة a^+ , a يصبح مؤثر هاملتون للمهتز التوافقي البسيط في الصورة

$$H = \left(a^{+}a + \frac{1}{2} \right)\hbar\omega \qquad (2.12)$$

وقوس التبادل بين المؤثرين a و a^{+} هو $[a, a^{+}] = 1$. و الآن بوضع $\overline{H} \equiv \frac{H}{\hbar\omega}$ في المعادلة (2.12) نحصل علي

$$\overline{H} = a^{+}a + \frac{1}{2} \qquad (2.13)$$

2.2 دالة الموجة للمهتز التوافقي بدلالة قواعد الطاقة

تُكتب دالة الموجة بدلالة الطاقة في الصورة $|\varepsilon>$ وتكون معادلة شرودنجر

$$\overline{H} |\varepsilon> = \varepsilon |\varepsilon> \qquad (2.14)$$

حيث ε هي القيمة الذاتية للطاقة مقاسه بوحدات $\hbar\omega$. ولمعرفة تأثير a علي دالة الطاقة $|\varepsilon>$ نستخدم أولاً قوس التبادل

$$[a, \overline{H}] = [a, a^{+}a + \frac{1}{2}] = [a, a a^{+}] = a \qquad (2.15)$$

وكذلك

$$[a^{+}, \overline{H}] = [a^{+}, a^{+}a + \frac{1}{2}] = [a^{+}, a^{+}a] = a^{+}[a^{+}, a] = -a^{+} \qquad (2.16)$$

من المعادلة (2.15) نجد أن $[a, \overline{H}] = a\overline{H} - \overline{H}a = a$ ومنها نحصل علي

$$\overline{H}a = a\overline{H} - a \qquad (2.17)$$

ومن المعادلة (2.16) نجد أن $a^{+}\overline{H} - \overline{H}a^{+} = -a^{+}$ ومنها نحصل علي

$$\overline{H}a^{+} = a^{+} + a^{+}\overline{H} \qquad (2.18)$$

و الآن بضرب طرفي المعادلة (2.17) في $|\varepsilon>$ وباستخدام المعادلة (2.14) نحصل علي

$$\begin{aligned} \overline{H}\, a |\varepsilon> &= (a\overline{H} - a)|\varepsilon> = a\overline{H}|\varepsilon> - a|\varepsilon> \\ \overline{H}\, a |\varepsilon> &= a\,\varepsilon|\varepsilon> - a|\varepsilon> = (\varepsilon - 1)a|\varepsilon> \end{aligned} \qquad (2.19)$$

أو

$$\overline{H}\, a |\varepsilon> = (\varepsilon - 1) a |\varepsilon> \qquad (2.20)$$

نلاحظ أن الحالة $a|\varepsilon>$ أصبحت دالة ذاتية للمؤثر $\bar{H}$ وبقيمة ذاتية $(\varepsilon-1)$، أي أن

$$\bar{H}\left(a|\varepsilon>\right)=(\varepsilon-1)\left(a|\varepsilon>\right) \qquad (2.21)$$

و الآن بضرب طرفي المعادلة (2.18) في $|\varepsilon>$ وباستخدام المعادلة (2.14) نحصل على

$$\bar{H}a^{+}|\varepsilon>=(a^{+}\bar{H}+a^{+})|\varepsilon>=a^{+}\bar{H}|\varepsilon>+a^{+}|\varepsilon>$$

$$\bar{H}\,a^{+}|\varepsilon>=a^{+}\,\varepsilon|\varepsilon>+a^{+}|\varepsilon>=(\varepsilon+1)a^{+}|\varepsilon> \qquad (2.22)$$

والتي تعني أن الدالة $a^{+}|\varepsilon>$ هي حالة ذاتية للمؤثر $\bar{H}$ بقيمة ذاتية $(\varepsilon+1)$، أي أن

$$\bar{H}\left(a^{+}|\varepsilon>\right)=(\varepsilon+1)\left(a^{+}|\varepsilon>\right) \qquad (2.23)$$

نلاحظ أن الحالة $|\varepsilon-1>$ هي حالة ذاتية للمؤثر $\bar{H}$ بقيمة ذاتية $(\varepsilon-1)$ أي أن

$$\bar{H}\left(|\varepsilon-1>\right)=(\varepsilon-1)\left(|\varepsilon-1>\right) \qquad (2.24)$$

ونلاحظ أن الحالتين $a|\varepsilon>$ و $|\varepsilon-1>$ لها نفس القيمة الذاتية للمؤثر $\bar{H}$ ولذلك فإنهما يتناسبان طردياً ، أي أن

$$|\varepsilon-1>\alpha\;\; a|\varepsilon> \qquad (2.25)$$

ويمكن أن نكتب هذه العلاقة في الصورة

$$a|\varepsilon>=C|\varepsilon-1> \qquad (2.26)$$

حيث C ثابت يمكن إيجاده.

ونلاحظ كذلك أن المؤثر a يعمل على إنقاص الطاقة بمقدار الوحدة، وبهذه الكيفية كلما أثّر a على حالة انقص طاقتها. ولكن لابد أن تكون هنالك حالة دنيا لا حالة دنيا بعدها. وتُعرف هذه الحالة بالحالة الأرضية ويرمز لها بالرمز $|\varepsilon_0>$ ، أي

$$a|\varepsilon_0>=0 \qquad (2.27)$$

وبضرب المعادلة أعلاه في a^{+} نحصل على

$$a^{+}a|\varepsilon_0>=0 \qquad (2.28)$$

ولكن من المعادلة (2.13) نجد أن

$$(\bar{H}-\frac{1}{2})|\varepsilon_0>=0 \qquad (2.29)$$

أو

$$\overline{H}\,|\,\varepsilon_0> = \frac{1}{2}\,|\,\varepsilon_0> \qquad (2.30)$$

وتعني أن طاقة الحالة الدنيا $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}$ بوحدات $\overline{H}$ أو $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ بوحدات H.

وعموماً نجد أن

$$n = 0,1,2,3,\cdots \qquad \varepsilon_n = n + \frac{1}{2} \qquad (2.31)$$

ويُعرف n بعدد الكم الرئيسي. و نجد من المعادلة أعلاه أن

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (2.32)$$

وبوضع $|\,n> = |\,\varepsilon>$ تكون $\overline{H}\,|\,n> = (n+\frac{1}{2})\,|\,n>$ ، أو علي الصورة

$$H\,|\,n> = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega\,|\,n> \qquad (2.33)$$

ولقد حصلنا علي نفس النتيجة لطاقة المهتز كما حصلنا عليه سابقاً بحل معادلة شرودنجر الغير معتمدة علي الزمن بدلالة الموقع فى بعد واحد.

ويُعّرف مؤثر العدد N بالعلاقة

$$N\,|\,n> = a^{+}a\,|\,n> = n\,|\,n> \qquad (2.34)$$

من المعادلة (2.26) نجد أن

$$a\,|\,n> = C\,|\,n-1> \qquad (2.35)$$

و الآن نأخذ الـ Adjoint لطرفي المعادلة أعلاه لنحصل على

$$<n\,|\,a^{+} = C^{*} <n-1\,| \qquad (2.36)$$

وبضرب المعادلتين (2.35) و (2.36) ببعضهما البعض (الأيمن بالأيمن والأيسر بالأيسر) نحصل على

$$<n\,|\,a^{+}a\,|\,n> = CC^{*} <n-1\,|\,n-1> = |\,C\,|^{2} \qquad (2.37)$$

وذلك لان $<n-1\,|\,n-1> = 1$ باعتبار أن الدالة $|\,n-1>$ مُعّايرة. وباستخدام المعادلة (2.34) تصبح المعادلة أعلاه في الصورة

$$<n\,|\,a^{+}a\,|\,n> = <n\,|\,n\,|\,n> = n = CC^{*} <n-1\,|\,n-1> = |\,C\,|^{2} \qquad (2.38)$$

حيث $<n|n>=1$ من شرط المُعّايرة. ومنها نجد أن $C=\sqrt{n}$. تصبح المعادلة (2.35) في الصورة

$$a|n>=\sqrt{n}|n-1> \qquad (2.39)$$

و الآن من المعادلة (2.23) نجد أن

$$\overline{H}\left(a^{+}|\varepsilon>\right)=(\varepsilon+1)\left(a^{+}|\varepsilon>\right) \qquad (2.40)$$

نجد أن الحالة $|\varepsilon+1>$ هي حالة ذاتية للمؤثر $\overline{H}$ بقيمة ذاتية $(\varepsilon+1)$ أي أن

$$\overline{H}(|\varepsilon+1>)=(\varepsilon+1)(|\varepsilon+1)> \qquad (2.41)$$

نلاحظ إن الحالتين $a^{+}|\varepsilon>$ و $|\varepsilon+1>$ لهما نفس القيمة الذاتية للمؤثر $\overline{H}$ ولذلك فانهما يتناسبان طردياً ، أي أن

$$|\varepsilon+1>\alpha\, a^{+}|\varepsilon> \qquad (2.42)$$

ويمكن أن نكتب هذه العلاقة في الصورة

$$a^{+}|\varepsilon>=D|\varepsilon+1> \qquad (2.43)$$

حيث D ثابت. وبعمل نفس الخطوات السابقة نجد أن $D=\sqrt{n+1}$ ومنها تكون المعادلة (2.43) علي الصورة التالية

$$a^{+}|n>=\sqrt{n+1}|n+1> \qquad (2.44)$$

ونلاحظ كذلك أن المؤثر a^{+} يعمل على زيادة الطاقة بمقدار الوحدة، وبهذه الكيفية كلما أثّر a^{+} على حالة زاد طاقتها.

2.3 مصفوفة المؤثرين الخافض والرافع (a و a^{+})

تكتب عناصر مصفوفة المؤثرات a a^{+}, بدلالة القواعد $(|n>)$ على الصورة

$$<n'|a|n> \quad , \quad <n'|a^{+}|n> \qquad (2.45)$$

أو

$$\begin{aligned} a_{mn} &=<m|a|n> \\ a_{mn}^{+} &=<m|a^{+}|n> \end{aligned} \qquad (2.46)$$

وباستخدام المعادلة (2.39) و**(2.44)** نحصل علي

$$\begin{aligned} a_{mn} &=<m|a|n>=<m|\sqrt{n}|n-1> \\ a_{mn} &=\sqrt{n}<m|n-1>=\sqrt{n}\;\delta_{n-1,m} \end{aligned} \qquad (2.47)$$

وكذلك نجد أن

$$a^{+}_{mn} = < m | a^{+} | n > = < m | \sqrt{n+1} | n+1 > \qquad (2.48)$$

$$a^{+}_{mn} = < m | a^{+} | n > = \sqrt{n+1} < m | n+1 > = \sqrt{n+1}\ \delta_{n+1,m}$$

حيث تُعطى $\delta_{n,m}$ بـالتعريف

$$.\delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \qquad (2.49)$$

وفى الشكل المصفوفي يمثل n رقم الصف و m رقم العمود. وتُكتب مصفوفة المؤثر a علي الصورة

$$a = \begin{pmatrix} <0|a|0> & <0|a|1> & <0|a|2> & <0|a|3> & \cdots \\ <1|a|0> & <1|a|1> & <1|a|2> & <1|a|3> & \cdots \\ <2|a|0> & <2|a|1> & <2|a|2> & <2|a|3> & \cdots \\ <3|a|0> & <3|a|1> & <3|a|2> & <3|a|3> & \cdots \\ <4|a|0> & <4|a|1> & <4|a|2> & <4|a|3> & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{pmatrix} \qquad (2.50)$$

نجد أن

$$<0|a|0> = 0 \text{ و } <0|a|1> = <0|0> = 1$$

و

$$<0 | a | 2> = <0 | \sqrt{2} | 1> = \sqrt{2} <0 | 1> = 0$$

حيث إستعملنا خاصية التعامد

$$<0|1> = <0|2> = 0$$

والمُعّايرة

$$<0|0> = <1|1> = <2|2> = 1$$

وبإتباع نفس الطريقة نحصل علي بقية العناصر وبالتعويض عن عناصر المصفوفة المختلفة تصبح المعادلة **(2.50)** نحصل علي

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} \end{pmatrix} \qquad (2.51)$$

وبالمثل نجد أن

$$a^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (2.52)$$

ويمكن أيضا الحصول علي مصفوفة a^{+} من مدورة a ثم أخذ المرافق لكل عنصر في المصفوفة.

2.4 مصفوفة مؤثر هاملتون H ومؤثر العدد N

بم أن

$$H = (a^{+}a + \frac{1}{2})\hbar\omega \qquad (2.53)$$

وباستخدام المعادلة (2.34) نجد أن

$$H|n> = (a^{+}a + \frac{1}{2})\hbar\omega|n> = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n> \qquad (2.54)$$

فإن عناصر مصفوفة مؤثر الطاقة $\hat{H}$ هي

$$\begin{aligned} H_{mn} &= <m|H|n> \\ H_{mn} &= <m|(n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n> \\ H_{mn} &= (n + \frac{1}{2})\hbar\omega <m|n> \\ H_{mn} &= (n + \frac{1}{2})\hbar\omega\,\delta_{n,m} \end{aligned} \qquad (2.55)$$

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (2.56)$$

ومن الواضح أن مصفوفة H مصفوفة قطرية. يمكن أيضاً أن نحصل علي مصفوفة H بطريقة أخرى وذلك باستخدام المؤثرين a و a^+ثم ضربهما كما في المعادلة $H=(a^+a+\frac{1}{2})\hbar\omega$ مباشرة.

تُعطى مصفوفة العدد N من المعادلة $N|n>=n|n>$ وتكون عناصر المصفوفة في الصورة

$$N_{mn}=<m|N|n>=<m|n|n>=n<m|n>=n\delta_{m,n} \qquad (2.57)$$

والتي تأخذ الشكل التالي

$$N=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (2.58)$$

وبالمثل يمكن أن نحصل علي N مباشرة بضرب مصفوفة a^+ مع مصفوفة a حيث $N=a^+a$.

2.5 مصفوفة مؤثر الموقع X وكمية الحركة الخطية P

نحصل علي مصفوفة مؤثر الموقع وكمية الحركة الخطية من مصفوفة المؤثرين a^+ و a حيث نكتب المؤثرين $\hat{X}$ و $\hat{P}$ بدلالة a,a^+ علي النحو

$$\begin{aligned} X &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^+) \\ P &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^+-a) \end{aligned} \qquad (2.59)$$

ومنها يكون

$$X_{mn} =< m | X | n >= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} < m | (a + a^{+}) | n >$$

$$X_{mn} =< m | X | n >= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(< m | a | n > + < m | a^{+} | n >\right) \qquad (2.60)$$

$$P_{mn} =< m | P | n >= i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} < m | (a^{+} - a) | n >$$

$$P_{mn} =< m | P | n >= i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \left(< m | a^{+} | n > - < m | a | n >\right) \qquad (2.61)$$

وبتعويض المصفوفتين a و a^{+} في المعادلتين (2.60) و (2.61) نحصل علي مصفوفة الموقع

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (2.62)$$

ومصفوفة كمية الحركة الخطية

$$P = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \qquad (2.63)$$

وبطريقة أخرى يمكن أن نوجد مصفوفة مؤثر هاملتون من معرفة مصفوفة X و P وذلك بالتعويض في المعادلة $H = \frac{P^{2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^{2}X^{2}$ والتي تطابق نفس المصفوفة التي حصلنا عليها سابقاً.

مثال (1):

مهتز توافقي بسيط موجود في الحالة العامة $|\psi>=\begin{pmatrix}1\\2\\1\\0\end{pmatrix}$.

(أ) أوجـــد الدالـــة المُعّـــايرة ثـــم أكتبهـــا فـــي الصـــورة العامـــة $|\psi>=\sum_{i=0} c_i|\psi_i>$.

(ب) أوجد متوسط طاقة المهتز في هذه الحالة.

(ت) أوجد الخطأ في قياس موقع المهتز هذه الحالة.

الحل

(أ) تكـون الدالـة مُعّـايرة إذا كـان $\sum_{i=0}^{3}|c_i|^2=1$ وبالتـالي نجـد أن الدالـة المُعّـايرة تُكتب في الصورة العامة

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{|c_0|^2+|c_1|^2+|c_2|^2+|c_3|^2}}\begin{pmatrix}c_0\\c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix}$$

وبـما أن $c_1=1$ و $c_1=2$ و $c_2=1$

و $c_3=0$ فإن الدالة المُعّايرة تصبح $|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\2\\1\\0\end{pmatrix}$. ويمكن كتابتها في الصورة

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}+\frac{2}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}+\frac{0}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

أو

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_0>+\frac{2}{\sqrt{6}}|\psi_1>+\frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_2>+\frac{0}{\sqrt{6}}|\psi_3>$$

حيـث $|\psi_0>=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}$ و $|\psi_1>=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$ و $|\psi_2>=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}$ و $|\psi_3>=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$ هــي القواعـد الأساسية للمتجه $|\psi>$.

(ب) يُعطى متوسط طاقة المهتز بالعلاقة $<E>=<\psi|H|\psi>$. بالنسبة للمهتز التـــوافقي نجـــد أن $|\psi_0>=|0>$ و $|\psi_1>=|1>$ و $|\psi_2>=|2>$ و $|\psi_0>=|0>$ و $|\psi_3>=|3>$ وبالتعويض عن $H=(a^+a+\frac{1}{2})\hbar\omega$ فإن $H|n>=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega|n>$.

ولكن

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}|0>+\frac{2}{\sqrt{6}}|1>+\frac{1}{\sqrt{6}}|2>+\frac{0}{\sqrt{6}}|3>$$

إذاً

$$|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}(|0>+2|1>+|2>)$$

وبالتالي نجد أن

$$H|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}(H|0>+2H|1>+H|2>)$$

$$H|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{1}{2}\hbar\omega|0>+2\frac{3}{2}\hbar\omega|1>+\frac{5}{2}\hbar\omega|2>\right)$$

$$H|\psi>=\frac{1}{2}\frac{\hbar\omega}{\sqrt{6}}(|0>+6|1>+5|2>)$$

ومنها نجد أن متوسط طاقة الحالة $|\psi>$ هو

$$<\psi|H|\psi>=\frac{1}{2}\frac{1}{6}\hbar\omega(1+12+5)=\frac{18}{12}\hbar\omega=\frac{3}{2}\hbar\omega$$

ونلاحظ أن متوسط الطاقات الثلاث هو حاصل جمعها مقسوماً على عددهما، أي $(\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2}\hbar\omega+\frac{3}{2}\hbar\omega+\frac{5}{2}\hbar\omega\right)=\frac{3}{2}\hbar\omega)$.

(ج) يُعطى الخطأ في قياس موقع الجسيم بالمعادلة $\Delta x=\sqrt{<x^2>-<x>^2}$. نحسب أولاً متوسط موقع الجسيم $<x>=<\psi|x|\psi>$ ولكن $x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^+)$. إذاً نجد أن

$$<x>=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}<\psi|(a+a^+)|\psi>=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}<\psi|a|\psi>+<\psi|a^+|\psi>$$

$$a|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}a|0>+\frac{2}{\sqrt{6}}a|1>+\frac{1}{\sqrt{6}}a|2>$$

$$a|\psi>=\frac{2}{\sqrt{6}}|0>+\frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{2}|1>$$

$$a|\psi>=\frac{2}{\sqrt{6}}|0>+\frac{1}{\sqrt{3}}|1>$$

وكذلك

$$a^+|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}a^+|0>+\frac{2}{\sqrt{6}}a^+|1>+\frac{1}{\sqrt{6}}a^+|2>$$

$$a^+|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}|1>+\frac{2}{\sqrt{6}}\sqrt{2}|2>+\frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{3}|3>$$

$$a^+|\psi>=\frac{1}{\sqrt{6}}|1>+\frac{2}{\sqrt{3}}|2>+\frac{1}{\sqrt{2}}|3>$$

والآن نجد أن

$$<\psi|a|\psi>=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}<0|+\frac{2}{\sqrt{6}}<1|+\frac{1}{\sqrt{6}}<2|\right)\left(\frac{2}{\sqrt{6}}|0>+\frac{1}{\sqrt{3}}|1>\right)$$

$$<\psi|a|\psi>=\frac{2}{6}+\frac{2}{3\sqrt{2}}=\frac{1}{3}+\frac{2}{3\sqrt{2}}$$

وكذلك

$$<\psi|a^+|\psi>=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}<0|+\frac{2}{\sqrt{6}}<1|+\frac{1}{\sqrt{6}}<2|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{6}}|1>+\frac{2}{\sqrt{3}}|2>+\frac{1}{\sqrt{2}}|3>\right)$$

$$<\psi|a^+|\psi>=\frac{2}{6}+\frac{2}{3\sqrt{2}}=\frac{1}{3}+\frac{2}{3\sqrt{2}}$$

وبالتعويض في متوسط الموقع نجد أن

$$<x>=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}<\psi|a|\psi>+<\psi|a^+|\psi>=2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{1}{3}+\frac{2}{3\sqrt{2}}\right)$$

نجد أن

$$<x^2>=\frac{\hbar}{2m\omega}<\psi|\left(a^2+aa^++a^+a+a^{+2}\right)|\psi>$$

$$<\psi|a^2|\psi>=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}<0|+\frac{2}{\sqrt{6}}<1|+\frac{1}{\sqrt{6}}<2|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{3}}|0>\right)=\frac{1}{\sqrt{18}}$$

$$<\psi|a^2|\psi>=\frac{1}{3\sqrt{2}}$$

$$<\psi|a^{+2}|\psi>=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}<0|+\frac{2}{\sqrt{6}}<1|+\frac{1}{\sqrt{6}}<2|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{3}}|1>+2|3>+\right)=\frac{2}{\sqrt{18}}$$

$$<\psi|a^{+2}|\psi>=\frac{2}{3\sqrt{2}}$$

$$<\psi|aa^+|\psi>=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}<0|+\frac{2}{\sqrt{6}}<1|+\frac{1}{\sqrt{6}}<2|\right)\left(\frac{1}{\sqrt{6}}|0>+\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{3}}|1>+\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}|2>\right)$$

$$<\psi|aa^+|\psi>=\frac{1}{6}+\frac{4}{3}+\frac{1}{2}$$

$$<\psi|aa^+\psi>=2$$

$$<\psi|a^+a|\psi>=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}<0|+\frac{2}{\sqrt{6}}<1|+\frac{1}{\sqrt{6}}<2|\right)\left(\frac{2}{\sqrt{6}}|1>+\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}|2>\right)$$

$$<\psi|a^+a|\psi>=\frac{4}{6}+\frac{1}{3}=1$$

وبالتعويض نحصل علي

$$< x^2 >= \frac{\hbar}{2m\omega} < \psi | a^2 | \psi > + < \psi | aa^+ | \psi > + < \psi | a^+ a | \psi > + < \psi | a^{+2} | \psi >$$

$$< x^2 >= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\frac{1}{3\sqrt{2}} + \frac{2}{3\sqrt{2}} + 2 + 1\right) = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + 3\right)$$

ويكون الخطأ في قياس موقع الجسيم هو

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} + 3\right) - \frac{2\hbar}{m\omega}\left(\frac{4}{3} + \frac{16}{9\sqrt{2}}\right)}$$

تمرين:

1- أحسب مصفوفة العناصر $< m | P^2 | n >$ و $< m | X^2 | n >$، ومن ثم أوجد مصفوفة طاقة الحركة وطاقة الوضع للمهتز التوافقي البسيط.

2- أحسب القيمة المتوسطة للطاقة الحركية E_k، $< n | E_k | n >$وطاقة الوضع $< n | V | n >$ للمهتز التوافقي البسيط.

3- أحسب الإنحراف المعياري (الخطأ أو الشك) في كل من $\hat{X}$ و $\hat{P}$ للحالة الأرضية ($| 0 >$) والحالة المثارة الأولى ($|1>$) للمهتز التوافقي البسيط.

4- أثبت أن:-

(أ) $(a + a^+)^2 = a^2 + aa^+ + a^+ a + a^{+2}$

(ب) $(a - a^+)^2 = a^2 - aa^+ - a^+ a + a^{+2}$

ومن ثم أثبت أن:

$$< n | X^2 | n >= \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(2n+1) \text{ و } < n | P^2 | n >= \left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)(2n+1)$$

5- أثبت أن متوسط X^3 يساوي صفر، أي $< n | X | n >=< n | X^3 | n >= 0$ حيث

$$X^3 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} (a^3 + a^{+3} + a^2 a^+ + aa^+ a + aa^{+2} + a^+ a^2 + a^+ aa^+ + a^{+2} a).$$

6- أثبت أن متوسط $(a + a^+)^2$ يساوي $(2n+1)$ وأن متوسط $(a - a^+)^2$ هو $-(2n+1)$.

7- أثبت $< n | (a + a^+)^4 | n >= 3(2n^2 + 2n + 1)$، ومن ثم أوجد $< n | X^4 | n >$.

8- أثبت أن للمهتز التوافقي $\Delta x\,\Delta p=\hbar(n+\frac{1}{2})$ لأي حالة عامة $|n>$.

2.6 دالة الحالة بدلالة الموقع – التمثيل الإحداثي

لقد حصلنا في الجزء 2.5 علي طاقة الحالة والآن نريد أن نحصل علي دالة الموجة التي تعتمد علي الموقع (x). يمكننا عموماً أن نكتب الحالة العامة $|n>$ بدلالة الحالة الأرضية $|0>$ علي النحو التالي

$$|n>=\frac{(a^{+})^{n}}{\sqrt{n!}}|0> \qquad (2.64)$$

ويمكننا الحصول على دالة الحالة المثارة الأولى $<x|1>=\psi_1(x)$ والتي تُعطى من $|1>=\frac{a^{+}}{\sqrt{1!}}|0>$ ودالة الحالة المثارة الثانية $<x|2>=\psi_2(x)$ والتي تُعطى من $|2>=\frac{(a^{+})^{2}}{\sqrt{2!}}|0>$ و ذلك بمعرفة دالة الحالة الأرضية $<x|0>=\psi_0(x)$.

2.6.1 الحالة الأرضية (The Ground State)

تُكتب دالة الحالة العامة علي الصورة

$$<x|n>=\psi_n(x) \qquad (2.65)$$

ونحصل عليها من المعادلة (2.64) وذلك بعد ضربها في $<x|$، أي

$$<x|n>=\psi_n(x)=\frac{(a^{+})^{n}}{\sqrt{n!}}<x|0> \qquad (2.66)$$

و نجد من المعادلة (2.39) أن

$$a|0>=0 \qquad (2.67)$$

وبضرب المعادلة أعلاه في $<x|$ تصبح

$$a<x|0>=0 \qquad (2.68)$$

ولكن يمكن أن نكتب

$$<x|0>=\psi_0(x) \qquad (2.69)$$

و نعلم أن المؤثر الخافض a يُعطى بـ

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,X+i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\,P \qquad (2.70)$$

حيث $P=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$, $X=x$. وبتعويض هذه الكميات في المعادلة (2.68) نحصل علي

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x\psi_0+\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial\psi_0}{\partial x}=0 \qquad (2.71)$$

وهي تُمّثل معادلة تفاضلية من الدرجة الأولى ويأخذ حلها في الصورة

$$\psi_0(x)=A\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2) \qquad (2.72)$$

حيث A ثابت تحدد قيمته من مُعّايرة الدالة. تعني مُعّايرة الدالة $\psi_0(x)$ أن

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0|^2\,dx=1 \qquad (2.73)$$

حيث نحصل على $A=\left(\dfrac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ ومنها تكون دالة الحالة الأرضية

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2) \qquad (2.74)$$

وطاقتها $E_0=\dfrac{1}{2}\hbar\omega$ ونحصل عليها من المعادلة (2.32) بوضع $n=0$ والتي تُعرف بالطاقة الأرضية (Zero-Point Energy).

2.6.2 الحالة المثارة الأولى (First Excited State)

تُعطى دالة الحالة المثارة الأولى بـ $<x|1>=\psi_1(x)$. ونحصل عليها من المعادلة (2.66) بوضع $n=1$. إذاً نجد أن

$$\psi_1(x)=<x|1>=a^+<x|0>=a^+\psi_0(x) \qquad (2.75)$$

وبما أن

$$a^+=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,X-i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}P \qquad (2.76)$$

حيث $P=\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$ و $X=x$ نجد أن

$$\psi_1(x)=\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_0 \qquad (2.77)$$

إذا

$$\psi_1(x)=\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x\psi_0-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial\psi_0}{\partial x}\right) \qquad (2.78)$$

أو

$$\psi_1(x)=\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x\psi_0+\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\frac{m\omega}{\hbar})x\psi_0\right)$$

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\psi_0$$

$$\psi_1(x)=\left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}x\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2) \qquad (2.79)$$

وتُعطى طاقتها من المعادلة (2.32) بوضع $n=1$ لنحصل علي $E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$.

2.6.3 الحالة المثارة الثانية (Second Excited State):

تُعطى دالة الحالة المثارة الثانية بالدالة

$$<x|2>=\psi_2(x) \qquad (2.80)$$

ونحصل عليها من المعادلة (2.66) بوضع $n=2$ حيث نجد أن

$$\psi_2(x)=<x|2>=\frac{1}{\sqrt{2}}a^+<x|1>=\frac{1}{\sqrt{2}}a^+\psi_1(x) \qquad (2.81)$$

وبم أن

$$a^+=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,X-i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}P \qquad (2.82)$$

حيث $P=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ و $X=x$ نجد أن

$$\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_1 \qquad (2.83)$$

إذاً

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x\psi_1 + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial \psi_1}{\partial x}\right) \qquad (2.84)$$

أو

$$\psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{8\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} (4x^2 - 3)\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

ونحصل علي طاقتها من المعادلة (2.32) بوضع $n = 2$ لنحصل علي $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$. وبالمقارنة مع الطريقة السابقة لحل معادلة شرودنجر وجدنا أن دالة الموجة لأي حالة عامة تُعطى بـ$\psi_n(x)$ والتي تأخذ الصورة

$$\psi_n(x) = N_n \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)H_n(x) \qquad (2.85)$$

حيث $N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}$ ثابت المُعّايرة حيث $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ و H_n هي دالة هيرمايت والتي تُعطى بـ

$$H_n = (-1)^n \exp(q^2)\frac{d^n}{dq^n}\exp(-q^2) \qquad (2.86)$$

حيث $q = \alpha\, x$. وتُعطى طاقة الحالة $\psi_n(x)$ بالعلاقة $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. وبوضع $n = 0,1,2,...$ نحصل على الدوال وطاقاتها. وتطابق هذه الدوال وطاقاتها الدوال المختلفة التي حصلنا عليها بطريقة ديراك (Dirac).

<u>مثال (2):</u>

يوجد مهتز توافقي في الحالة العامة في البدء $(t = 0)$

$|\psi> = N(3|0> + 4i|1>)$

حيث N ثابت المُعّايرة.

(أ) أحسب ثابت المُعّايرة N ومن ثم أكتب الدالة المُعّايرة للمهتز.

(ب) أوجد إحتمال وجود المهتز في الحالات التالية في البدء $(t = 0)$

(i) الحالة الأرضية (ii) المثارة الأولى (ii) المثارة الثانية

(ج) أوجد متوسط $<x>$ و $<p>$ و $<H>$ عند أي لحظة t و الخطأ في كل من x و p.

(د) معتمداً علي النتيجة (ج) صِف التغير (التطور) الزمني للمهتز التوافقي الكمي.

الحل

(أ) توصف الحالة العامة للمؤثر التوافقي في البدء $(t=0)$ بالدالة

$$|\psi>=c_0|0>+c_1|1>+c_2|2>+\cdots+c_n|n>$$

وفى هذه الحالة نجد أن

$$|\psi(0)>=3N|0>+4iN|1>$$

ومنها يكون

$$.<\psi|=3N^*<0|-4iN^*<1|$$

ومن شرط مُعّايرة الدالة فإن $<\psi(0)|\psi(0)>=1$ ومنها نجد أن

$$<\psi|\psi>=|N|^2\left[9<0|0>+12i<0|1>+16<1|1>-12i<1|0>)\right]$$

وبم أن

$$<0|1>=<1|0>=0 \text{ و } <0|0>=<1|1>=1$$

فإن

$$<\psi|\psi>=|N|^2\left[9<0|0>+16<1|1>\right]$$

$$<\psi|\psi>=|N|^2\left[9+16\right]=1$$

$$<\psi|\psi>=25|N|^2=1$$

ومنها نجد أن $N=\frac{1}{5}$. وتصبح حالة المهتز الابتدائية $(t=0)$ في الصورة

$$|\psi(0)>=\frac{3}{5}|0>+\frac{4i}{5}|1>$$

وتُعطى حالة المهتز عند أي لحظة t بالدالة

$$|\psi(t)>=\sum_{n=0}\exp(-\frac{iE_n}{\hbar}t)|\psi(0)>$$

حيث $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$. وبالتعويض عن $|\psi(0)>=\sum_{n=0}c_n|n>$ نحصل علي

$$|\psi(t)>=\sum_{n=0}^{1}c_n\exp(-\frac{iE_n}{\hbar}t)|n>=\exp(-\frac{iE_0}{\hbar}t)\frac{3}{5}|0>+\frac{4i}{5}\exp(-\frac{iE_1}{\hbar}t)|1>$$

وبتعويض $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ و $E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$ تصبح الدالة عند أي لحظة t في الصورة

$$|\psi(t)>=\frac{1}{5}\exp(-\frac{i}{2}\omega t)\big(3|0>+4i\exp(-i\omega t)|1>\big)$$

ومرافقها هو

$$<\psi(t)|=\frac{1}{5}\exp(\frac{i}{2}\omega t)\big(3<0|-4i\exp(i\omega t)<1|\big)$$

(ب) يُعطى إحتمال وجود الجسيم في الحالة الأرضية $(|0>)$ عند $t=0$ بـ

(i)

$$P_0=|<0|\psi(0)>|^2=|<0|(\frac{3}{5}|0>+\frac{4i}{5}|1>)|^2$$

$$P_0=\frac{9}{25}|<0|0>|^2+\frac{16}{25}|<0|1>|^2=\frac{9}{25}$$

و إحتمال وجود الجسيم في الحالة المثارة الأولى $(|1>)$ عند $t=0$ بـ

$(ii$

$$P_1=|<1|\psi(0)>|^2=|<1|(\frac{3}{5}|0>+\frac{4i}{5}|1>)|^2$$

$$P_1=\frac{9}{25}|<1|0>|^2+\frac{16}{25}|<1|1>|^2=\frac{16}{25}$$

و إحتمال وجود الجسيم في الحالة المثارة الثانية $(|2>)$ عند $t=0$ بـ

(iii)

$$P_2=|<2|\psi>|^2=|<2|(\frac{3}{5}|0>+\frac{4i}{5}|1>)|^2$$

$$P_2=\frac{9}{25}|<2|0>|^2+\frac{16}{25}|<2|1>|^2=0$$

وذلك لان $<2|0>=<2|1>=0$.

(ج) (i) يُعطى متوسط الطاقة عند أي لحظة t بـ

$$<H>=<\psi(t)|H|\psi(t)>$$

وبم أن

$$H = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

فإن متوسط الطاقة يكون

$$< H >=< \psi(t) | (N + \frac{1}{2})\hbar\omega | \psi(t) >$$

ولكن $N | 0 >= 0$ و $N | 1 >=| 1 >$ وبالتالي نجد أن

$$N | \psi(t) >= \frac{1}{5}\exp(-\frac{i}{2}\omega t)\left(3N | 0 > +4i\exp(-i\omega t)N | 1 >\right)$$

$$N | \psi(t) >= \frac{1}{5}\exp(-\frac{i}{2}\omega t)\left(0 | 0 > +4i\exp(-i\omega t) | 1 >\right) = \frac{4i}{5}\exp(-\frac{3i}{2}\omega t) | 1 >$$

ومنها يكون

$$< H >=< \psi(t) | (N + \frac{1}{2})\hbar\omega | \psi(t) >$$

$$< H >= \hbar\omega < \psi(t) | N | \psi(t) > + \frac{1}{2}\hbar\omega < \psi(t) | \psi(t) >$$

$$< H >= \hbar\omega < \psi(t) | N | \psi(t) > + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

أولأنوجد المقدار $< \psi(t) | N | \psi(t) >$ الذي يُعطى المقدار

$$< \psi(t) | N | \psi(t) >= \left(\frac{1}{5}\exp(\frac{i}{2}\omega t)\left(3 < 0 | -4i\exp(i\omega t) < 1 |\right)\right)$$

$$\times\left(\frac{4i}{5}\exp(-\frac{3i}{2}\omega t) | 1 >\right)$$

أو

$$< \psi(t) | N | \psi(t) >= \left(\frac{4i}{25}\exp(-i\omega t)3 < 0 | 1 > -\frac{16}{25} < 1 | 1 >\right) = \frac{16}{25}$$

وبالتعويض في المعادلة أعلاه نجد أن

$$< H >= \hbar\omega < \psi(t) | N | \psi(t) > + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$< H >= \frac{16}{25}\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{57}{50}\hbar\omega$$

$$< H >= \frac{57}{50}\hbar\omega = 1.14\hbar\omega$$

نلاحظ أن متوسط الطاقة مقداراً ثابتاً ويساوي مقداراً فوق النصف بين طاقة الحالة الأرضية والمثارة الأولى بقليل.

الجدير بالذكر إنّه يمكن الحصول علي متوسط الطاقة ببساطة من تعريف متوسط الطاقة الذي يُعطى بالمعادلة $\overline{E} \equiv < E >= \sum_{n=0}^{n} P_i E_i$ ، حيث P_i هو إحتمال الحصول علي الحالة i بطاقة E_i. وفى هذه الحالة يصبح $\overline{E}$ علي الصورة

$$\overline{E} = P_0 E_0 + P_1 E_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega(0.36) + \frac{3}{2}\hbar\omega(0.64) = 1.14\hbar\omega$$

وهو نفس المقدار الذي حصلنا عليه سابقاً.

(ii) يُعطى متوسط الموقع بـ$< x >=< \psi(t) | x | \psi(t) >$ حيث $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+)$ ، إذ يكون متوسط موقع المهتز علي الصورة

$$< x >= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} < \psi | (a + a^+) | \psi >$$

نحسب أولاً $a | \psi(t) >= \frac{1}{5}\exp(-\frac{i}{2}\omega t)\left(3a | 0 > + 4i\exp(-i\omega t) a | 1 >\right)$

ولكن نعلم مما سبق أن $a | 0 >= 0$ و $a | 1 >= | 0 >$ ومنها نجد أن

$$a | \psi(t) >= \frac{4i}{5}\exp(-\frac{3i}{2}\omega t) | 0 >$$

وكذلك فإن $a^+ | \psi(t) >= \frac{1}{5}\exp(-\frac{i}{2}\omega t)\left(3a^+ | 0 > + 4i\exp(-i\omega t) a^+ | 1 >\right)$

ولكن نعلم مما سبق أن $a^+ | 0 >= | 1 >$ و $a^+ | 1 >= \sqrt{2} | 2 >$ ومنها نجد أن

$$a^+ | \psi(t) >= \frac{1}{5}\exp(-\frac{i}{2}\omega t)\left(3 | 1 > + 4i\exp(-i\omega t)\sqrt{2} | 2 >\right).$$

إذاً يكون متوسط موقع الجسيم هو

$$<\psi(t)|x|\psi(t)>=\frac{1}{25}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(12i\exp(-i\omega t)<0|0>-12i\exp(i\omega t)<1|1>\right)$$

$$=\frac{12i}{25}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\exp(-i\omega t)-\exp(i\omega t)\right)=\frac{24}{25}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sin(\omega t)$$

حيث $\sin(\omega t)=\left(\dfrac{\exp(i\omega t)-\exp(-i\omega t)}{2i}\right)$.

ولإيجاد الخطأ في قياس الموقع نحسب أولاً $<x^2>$ ومن ثم يكون الخطأ

$$\Delta x=\sqrt{<x^2>-<x>^2}$$

حيث $x^2=\dfrac{\hbar}{2m\omega}(a^2+aa^++a^+a+a^{+2})$ ويصبح متوسط مربع الموقع في الصورة

$$<\psi|x^2|\psi>=\frac{\hbar}{2m\omega}(<\psi|a^2|\psi>+<\psi|aa^+|\psi>+<\psi|a^+a|\psi>+<\psi|a^{+2}|\psi>)$$

والآن نجد أن

$$<\psi(t)|a^{+2}|\psi(t)>$$

$$=\left(\frac{3}{5}\exp(i\omega t)<0|-\frac{4i}{5}\exp(\frac{3}{2}i\omega t)<1|\right)$$

$$\times\left(\frac{3}{5}\sqrt{2}\exp(-\frac{1}{2}i\omega t)|2>+\frac{4i}{5}\sqrt{6}\exp(-\frac{3}{2}i\omega t)|3>\right)$$

$$<\psi(t)|a^{+2}|\psi(t)>=0$$

و

$$<\psi(t)|a^2|\psi(t)>=0$$

و

$$< \psi(t)|aa^+|\psi(t)>$$

$$= \left(\frac{3}{5}\exp(-\frac{1}{2}i\omega t) < 0| - \frac{4i}{5}\exp(\frac{3}{2}i\omega t) < 1|\right)$$

$$\times\left(\frac{3}{5}\exp(-\frac{1}{2}i\omega t)|0> + \frac{8i}{5}\exp(-\frac{3}{2}i\omega t)|1>\right)$$

$$< \psi(t)|aa^+|\psi(t)> = \frac{9}{25} + \frac{32}{25}$$

$$< \psi(t)|a^+a|\psi(t)> = \left(\frac{3}{5}\exp(\frac{1}{2}i\omega t) < 0| - \frac{4i}{5}\exp(\frac{3}{2}i\omega t) < 1|\right)$$

$$\times\left(\frac{4i}{5}\exp(-\frac{3}{2}i\omega t)|1>\right)$$

$$< \psi(t)|a^+a|\psi(t)> = \frac{16}{25}$$

وبالتعويض في المعادلة السابقة نجد أن

$$< \psi(t)|x^2|\psi(t)> = \frac{57\hbar}{50m\omega}$$

ومنها نحصل علي

$$\Delta x = \frac{24}{25}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\frac{91}{384} + \cos^2 \omega t}$$

وبم أن

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

فإن

$$< p^2 > = 2m\left(< H > - \frac{1}{2}m\omega^2 < x^2 >\right)$$

وبالتعويض عن $< H >$ و $< x^2 >$ نحصل علي $< p^2 > = \frac{57}{50}m\hbar\omega$ ومنها يكون الخطأ في قياس كمية الحركة هو $\Delta p = \sqrt{< p^2 > - < p >^2}$.

وبالتعويض نجد أن

$$\Delta p = \frac{57}{50}\hbar m\,\omega\,(1-\frac{576}{1425}\cos^2(\omega t))$$

ونلاحظ أن $\Delta p \neq 0$ وذلك لان أكبر قيمة لـ $\cos(\omega t)$ هو 1.0. ونجد كذلك أن علاقة هايزنبرج لعدم التأكد التي تُعطى بـ

$$\Delta x\,\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

تتحقق بالتعويض من المعادلة السابقة.

(د) بالنظر إلى متوسط الموقع وكمية الحركة و Δx يمكن أن نحصل علي وصف دقيق للتغير الزمني لدالة موجة المنظومة دون حساب دالة الموجة بدلالة الموقع أو كمية الحركة. وبم أن متوسط كمية الحركة والموقع يتغيران جيبياً (sinusoidally) وبنفس التردد يصبح من الواضح أن الموجة تتذبذب بنفس التردد. ونجد متوسط كمية الحركة يتذبذب بنفس التردد مع متوسط الموقع بحيث يصنع زاوية طور 90^0 فعندما يكون متوسط الموقع في المركز يكون متوسط كمية الحركة أكبر ما يمكن واقل ما يمكن (صفر) عندما يكون متوسط الموقع في الأطراف. ونلاحظ أن عرض الموجة الممثلة بالمقدار Δx يتذبذب بقيمته العظمى عندما تكون الدالة متمركزة في الوسط. وتحدث أقل قيمة للمقدار عندما تكون الدالة في الأطراف.

مثال(3):

وُضع إلكترون في مجال مغناطيسي كثافته B في اتجاه المحور z ، أي $\vec{B} = B\hat{k}$ وكان مؤثر هاملتون له $H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ حيث $\mu = \frac{\hbar\gamma}{2}\sigma$ وأن $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ و γ ثابت.

(أ) أكتب معادلة شرودنجر لهذا الإلكترون ومن ثم أوجد الحل العام لهذه المعادلة.

(ب) إذا كان الإلكترون في البدء $(t=0)$ في الحالة الذاتية للمؤثر S_x التي تقابل القيمة الذاتية $\frac{\hbar}{2}$، فأوجد الحالة العامة عند أي لحظة t.

(ج) أوجد إحتمال وجود الإلكترون بقيمة $\frac{\hbar}{2}$ للمؤثر S_y عند أي لحظة t.

الحل

تُعطى معادلة شرودنجر بـ

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)>=H|\psi(t)>$$

حيث $|\psi(t)>=\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}$ وبالتعويض نحصل علي

$$-\frac{\hbar\gamma}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}$$

التي تُعطى المعادلتين التاليتين

$$-\frac{\hbar\gamma}{2}a=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a$$

$$\frac{\hbar\gamma}{2}b=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}b$$

ويكون حلهما على الصورة

$$a(t)=a_0\exp(i\frac{\gamma t}{2})$$

$$b(t)=a_0\exp(-i\frac{\gamma t}{2})$$

حيث a_0 و b_0 ثابتان. ونكتب دالة الحالة علي الصورة

$$|\psi(t)>=\begin{pmatrix}a_0\exp(\frac{i\gamma t}{2})\\b_0\exp(-\frac{i\gamma t}{2})\end{pmatrix}\qquad (A)$$

فعند $t=0$ نجد أن

$$|\psi(0)>=\begin{pmatrix}a_0\\b_0\end{pmatrix}\qquad (B)$$

(ب) نوجد أولاًالدوال الذاتية للمؤثر S_x والقيم الذاتية المناظرة لها علي النحو

$$S_x|\phi>=\lambda|\phi>$$

حيث $S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$، فنحصل من هذه المعادلة علي القيم الذاتية $\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}$
وتكون الدالة الذاتية المقابلة لـ $\lambda = \frac{\hbar}{2}$ هي $|\phi_+ >= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ وبالتالي نحصل من المعادلة (A) علي أن $|\psi(t=0) >= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$، أي $a_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$
وبالتعويض في (B) ومن ثم نحصل علي

$$|\psi(t) >= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{\frac{i\gamma t}{2}} \\ e^{-\frac{i\gamma t}{2}} \end{pmatrix}.$$

(ج) نوجد أولاًالدوال الذاتية والقيم الذاتية للمؤثر S_y. نحصل علي هذه الدوال من معادلة القيمة الذاتية لـ S_y علي النحو

$$S_y |\chi >= \lambda |\chi >$$

ومنها نحصل علي القيمتين الذاتيتين $\lambda = \pm\frac{\hbar}{2}$، حيث تكون الدالة الذاتية للقيمة الذاتية $\lambda = \frac{\hbar}{2}$ هي $|\chi_+ >= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$. ويُعطى إحتمال وجود الإلكترون في الحالة $|\chi_+ >$ بـ

$$P_+ = |<\chi_+ |\psi(t) >|^2 = \frac{1}{4}|(1 \quad -i)\begin{pmatrix} e^{\frac{\gamma t}{2}} \\ e^{-i\frac{\gamma t}{2}} \end{pmatrix}|^2$$

$$P_+ = \frac{1}{4}|(e^{i\frac{\gamma t}{2}} \quad -i\, e^{-i\frac{\gamma t}{2}})|^2 = \frac{1}{2}(1-\sin(\gamma t))$$

ويعني هذا أن الإحتمال يتراوح بين الواحد الصحيح والصفر $(0 \le P_+ \le 1)$ وبتردد زاوي مقداره γ.

تمرين:

(1) أوجد القيمة المتوسطة للموقع للحالة المثارة الأولى والثانية للمهتز التوافقي البسيط.

(2) أوجد دالة الحالة المثارة الثالثة بدلالة الموقع x وكذلك بدلالة كمية الحركة p حيث $\psi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\exp(-ipx)\,dx$ (يُعرف هذا بتحويل فورير *Fourier*).

(3) أوجد القيمة المتوسطة لطاقة الحركة والوضع للحالة المثارة الأولى للمهتز التوافقي.

(4) إذا كان

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2.$$

و

$$\hat{X}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x},\qquad \hat{P}=\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\hat{p}$$

أثبت أن

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{P}-i\hat{X})$$

$$a^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{P}+i\hat{X})$$

وأن مؤثر هاملتون يأخذ الصورة

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)\,\hbar\omega$$

ومن ثم أثبت أن

$$\hat{H} = (a^\dagger a + \frac{1}{2})\,\hbar\omega$$

(5) أثبت أن متوسط طاقة الجهد للحالة $|n>$ تساوي نصف الطاقة الكلية للمهتز.

(6) أثبت أن $\hat{X}^+ = \hat{X}$ و $\hat{P}^+ = \hat{P}$ و $\hat{H}^+ = \hat{H}$ (مؤثرات هيرميتية).

(7) إذا كان مؤثر هاملتون للمهتز التوافقي في مستوي ذو بعدين هو

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2) = H_x + H_y$$

حيث

$$H_x = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \text{ و } H_y = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}ky^2 \text{ و } H_i = \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}kq_i^2 \;\; (i = x, y)$$

فإذا كان

$$N_x = a_x^+ a_x \text{ و } N_y = a_y^+ a_y$$

(أ) أثبت أن

$$H = (N_x + N_y + 1)\hbar\omega \text{ و } [N_x, N_y] = 0 \text{ و } [N_x, H] = [N_y, H] = 0$$

حيث

$$[a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \text{ و } [a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \,.$$

إذا كانت $|n_x n_y> = |n_x>|n_y>$ حيث n_i هي القيمة الذاتية للمؤثر N_i، أثبت أن القيمة الذاتية لطاقة المهتز تُعطى بـ

$$E = (n_x + n_y + 1)\hbar\omega = (n + 1)\hbar\omega$$

حيث $n = n_x + n_y$.

(ب) أثبت أن كمية الحركة الزاوية $L = xp_y - yp_x = i\hbar(a_x a_y^+ - a_x^+ a_y)$ ومن ثم أثبت أن L يتبادل مع H ولا يتبادل مع N_x و N_y منفرداً. ما هو تفسيرك لهذه الحالة؟ أوجد متوسط L في الحالة $|n_x n_y>$.

(ج) إذا كان $K_{xy} = \frac{p_x p_y}{2m} + \frac{1}{2}kxy$ ، أثبت أن $[K_{xy}, H] = 0$. أكتب K_{xy} بدلالة (a_i, a_i^+). وإذا كان $F_3 = \frac{1}{2}L$, $F_2 = \frac{1}{2\omega}K_{xy}$, $F_1 = \frac{1}{2\omega}(H_x - H_y)$

فأوجد $[F_3, F_1]$, $[F_2, F_3]$, $[F_1, F_2]$ ثم أثبت أنها عملية مغلقة.

(د) إذا كان

$$A_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x \mp i a_y) \qquad \text{و} \qquad A_\pm^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x \pm i a_y)$$

أثبت أن $[A_i, A_j] = [A_i^+, A_j^+] = 0$ و $[A_i, A_j^+] = \delta_{ij}$ حيث $i, j = \pm$.

(هـ) إذا كان $N_\pm = A_\pm^+ A_\pm$ ، أثبت أن

$$H = (N_+ + N_- + 1)\hbar\omega \text{ و } L = (N_+ - N_-)\hbar \text{ و } [H, N_+] = [H, N_-] = 0$$

وإذا كانت الدالة الذاتية للمؤثرين N_+ و N_- هي $|n_+ n_- \rangle = |n_+\rangle |n_-\rangle$ بالقيمتين الذاتيتين n_+ و n_- علي التتالي، فوّضح إنّهما أيضاً دالتان ذاتيتان للمؤثر L.

(و) أثبت أن القيمتين الذاتيتين للطاقة وكمية الحركة هما

$$E = (n_+ + n_- + 1)\hbar\omega \qquad \text{و} \qquad L = (n_+ - n_-)\hbar = m\hbar$$

حيث $m = (n_+ - n_-)$.

(8) يحقق المؤثران a و a^+ المعادلتين $aa^+ + a^+a = 1$ و $a^2 = a^{+2} = 0$.

(أ) هل يمكن أن يكون المؤثر a هيرميتيا ؟

(ب) أثبت أن القيم الذاتية للمؤثر $N = a^+a$ هي 0 و 1.

(ج) أوجد مصفوفة المؤثرات a و a^+ و N.

(9) إذا كان $[a, a^+] = 1$ فأثبت أن $[a, a^{+n}] = na^{+(n-1)}$ ثم أوجد $\left[a, \frac{\partial}{\partial a^+}\right]$ و $\left[a^+, \frac{\partial}{\partial a}\right]$.

الفصل الثالث

كميات الحركة الزاوية

Angular Momenta

الحركة الدائرية:

إذا تحرك جسيم كتلته m في مدار دائري، كما في الرسم أعلاه، فإن كمية الحركة الزاوية له وفقا للميكانيكا الكلاسيكية تُعطي بـ

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \qquad (3.1)$$

حيث $\vec{p} = m\vec{\mathrm{v}}$ هي كمية الحركة الخطية و $\vec{r}$ متجه موضع الجسيم.

وبتفاضل الطرفين نجد أن

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r} \times \frac{d\vec{p}}{dt} + \frac{d\vec{r}}{dt} \times \vec{p} = \vec{r} \times \vec{F} + \vec{\mathrm{v}} \times (m\vec{\mathrm{v}}) \qquad (3.2)$$

بم أن $\vec{\mathrm{v}} \times \vec{\mathrm{v}} = 0$ ، نجد أن $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F} = \vec{\tau}$ هو عزم القوة. فإذا كان $\vec{\tau} = 0$ فإن $\frac{d\vec{L}}{dt} = 0$. أي أن $\vec{L} = const.$. وتُعرف كمية الحركة الزاوية L بكمية الحركة الزاوية المدارية (Orbital Angular Momentum)، وبالتالي تلعب كمية الحركة الزاوية المدارية دوراً مهماً في الحركة الدائرية حيث تمثل مقدارا محافظا لا يتغير بتغير سرعته وبعد الجسيم عن مركز الحركة. ولهذا السبب تستخدم كمية الحركة الزاوية لوصف حركة الجسيم الذي يتحرك في مدار دائري بالإضافة لطاقته.

3.1 مركبات كمية الحركة الزاوية المدارية

تُعطي مركبات كمية الحركة الزاوية المدارية ($\vec{L}$) في الميكانيكا الكلاسيكية بـ

$$L_x = yp_z - zp_y$$
$$L_y = zp_x - xp_z$$
$$L_z = xp_y - yp_x \qquad (3.3)$$

وللحصول علي الصيغ المقابلة لها في ميكانيكا الكم تصبح

$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ و $\vec{r} = (x, y, z)$

مؤثرات، أي

$\vec{p} \rightarrow \hat{p}$ و $r \rightarrow \hat{r}$

حيث تكون مركبات $\hat{p}$ هي

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \quad \text{و} \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \quad \text{و} \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$$

ومركبات $\hat{r}$ هي

$\hat{x} = x$ و $\hat{y} = y$ و $\hat{z} = z$.

وبذلك تصبح مركبات كمية الحركة الزاوية في الصورة

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y \quad \text{و} \quad \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z \quad \text{و} \quad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$$

أو

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \quad \text{و} \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \quad \text{و} \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$$

وتحقق مركبات كمية الحركة الزاوية أقواس التبادل التالية

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$
$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$
$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \qquad (3.4)$$

وتعني هذه المعادلات أنه لا توجد دالة ذاتية مشتركة لمركبتين من مركبـات $\vec{L}$.
وبعبـارة أخـرى لا يمكـن قيـاس مـركبتين مـن مركبـات كميـة الحركـة الزاويـة

المدارية في نفس اللحظـة. ونخلص الـي أنـه لا يمكن تمثيل متجـه كميـة الحركـة الزاوية المدارية للجسيم. ولكن يمكن قياس إحدى مركبات كمية الحركـة الزاويـة مع مربع كمية الحركة الزاوية الكلية، ونجد أن

$$[\vec{L}, \vec{L}^2] = 0 \tag{3.5}$$

ويعني هذا أن الدالـة الذاتيـة للمؤثر L^2 تكون دالـة ذاتيـة لأحد مركبـات $\vec{L}$ فقط. ويمكن أن نكتب أقواس التبادل (3.4) لكمية الحركة الزاوية في الصـورة

$$\vec{L} = i\hbar\,\vec{L} \times \vec{L}$$

فلو كان $\vec{L}$ متجهاً عادياً لكان حاصل الضـرب الاتجـاهي صـفراً ، ولكن $\vec{L}$ متجـه غيـر عــادى. تُعـرف مثـل هـذه المتجهـات بالمتجهـات المحوريـة (**axial-vector**) أو شـبه المتجهـات (**pseudo-vector**). وعمومـاً نختـار المؤثرات التالية

$$H, \vec{L}^2, \text{and } L_z$$

لتكّون مجموعة المؤثرات المتبادلـة بينيـاً ، أي $[L^2, H] = [L^2, L_z] = [L_z, H] = 0$.
وتكـون لمثـل هـذه المـؤثرات دالـة ذاتيـة واحـدة (مشـتركة). ولكـي تكـون كميـة الحركة الزاوية مقداراً محافظاً يجب أن تتبادل مع مؤثر هاملتون.
إذا كان الجسيم يتحرك في جهد مركزي $V(r)$ فإن مؤثر هاملتون له يأخذ الشكل

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right] + \frac{\vec{L}^2}{2\mu r^2} + V(r) \tag{3.6}$$

حيث μ كتلـة الجسيم. ويُعطـي مربـع كميـة الحركـة الزاويـة المداريـة الكليـة فـي الإحداثيات الكرية بـ

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) \quad (3.7)$$

وتكون معادلة شرودنجر

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.8)$$

حيث E هي الطاقة الكلية للجسيم. ويكون حلها على الصورة

$$\Psi = R(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \qquad \vec{L}^2 Y_{\ell m} = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m} \quad (3.9)$$

ويُعطـــــي مقـــــدار كميـــــة الحركـــــة الزاويـــــة المداريـــــة الكليـــــة $L = \sqrt{L_x^2 + L_y^2 + L_z^2} = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ حيـــــث يأخـــــذ ℓ القـــــيم التاليـــــة $\ell = 0, 1, 2, \cdots, n-1$ والذي يُعرف بعدد الكم المداري. نجد أن الدالة $Y_{\ell m}$ لا تعتمد على المتغير r وتعتمد فقط على (θ, φ).

تُعرف الدوال $Y_{\ell m}$ بالتوافقيات الكرية (Spherical Harmonics). وتحقق الدالة $R(r)$ المعادلة النصف– قطرية المعادلة التالية

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R(r) + V(r) R(r) = E R(r) \quad (3.10)$$

فإذا كان $V = 0$ تصبح دالة الموجة في الصورة

$$\Psi(r, \theta, \phi) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (3.11)$$

حيث تُعرف الدالة $j_\ell(kr)$ بدالة بيزل (Bessel-function) الكرية وهي دالة معروفة الشكل. وتصف الدالة أعلاه حركة جسيم له كمية حركة خطية

$p=\hbar k$ وكميــة حركــة زاويــة تعتمــد علــى ℓ,m . وتحقــق الدالــة $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ المعادلتين التاليتين

$$L_z Y_{\ell m}=m\hbar Y_{\ell m},\qquad \vec{L}^2 Y_{\ell m}=\ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m} \tag{3.12}$$

حيث تُعطي مركبة كمية الحركة الزاوية في إتجاه المحور z بـ

$$L_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{3.13}$$

حيث m عدد صحيح يتراوح بين $-\ell\le m\le\ell$ و يُعرف بعدد الكم المغناطيسي (Orbital Magnetic Number)، وتصبح بالتالي لـ m قيم مختلفة عددها يساوي $2\ell+1$ ويُعرف بالتعددية (multiplicity).

وتُعطي مركبة كمية الحركة الزاوية في إتجاه x في الإحداثيات الكرية بـ

$$\hat{L}_x=-i\hbar\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{3.14}$$

ومركبة كمية الحركة الزاوية في إتجاه y بـ

$$\hat{L}_y=-i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{3.15}$$

ومربع كمية الحركة الزاوية المدارية الكلية بـ

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) \tag{3.16}$$

مثال (1):

أوجد عدد الكم المغناطيسي للحالات التالية (حيث N ثابت):

(أ) $\psi=N\exp(3i\varphi)$ (ب) $\psi=N\sin(2\theta)\exp(-i\varphi)$ (ج) $\psi=N\cos(4\theta))$

الحل

(أ) يُعطـي عـدد الكـم المغناطيسـي m مـن المعادلـة $L_z\psi = m\hbar\psi$. إذاً نجـد أن $L_z\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = (3i)N\exp(3i\varphi) = 3\hbar\psi$ وبالمقارنـة مـع المعادلـة أعـلاه نجـد أن $m = 3$.

(ب) $L_z\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = (-i)N\sin(2\theta)\exp(-i\varphi) = -\hbar\psi$ ومنها نجد أن $m = -1$.

(ج) $L_z\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = 0$ وذلك لأن الدالة لا تعتمد علي φ، ومنها نجد أن $m = 0$.

***

من المؤثرات ذات الأهمية المؤثر الرافع (L_+) والخـافض (L_-) واللذان يُعرفان على النحو التالي

$$L_\pm = L_x \pm iL_y \tag{3.17}$$

ونجد أن

$$L_+L_- = (L_x + iL_y)(L_x - iL_y) = L_x^2 + iL_yL_x - iL_xL_y + L_y^2$$

وبإستخدام قوس التبادل $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ نحصل علي

$$L_+L_- = L_x^2 + L_y^2 - i[L_x, L_y] = L_x^2 + L_y^2 + \hbar L_z \tag{3.18}$$

وبم أن $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$ تصبح المعادلة أعلاه في الصورة

$$L^2 = L_+L_- + L_z^2 - \hbar L_z \tag{3.19}$$

وبالمثل نجد أن

$$L_-L_+ = L^2 - L_z^2 - \hbar L_z \tag{3.20}$$

ومنها نحصل علي

$$L^2 = L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z \tag{3.21}$$

والآن نجد أن

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z \tag{3.22}$$

وكذلك

$$[L_+, L_z] = -\hbar L_+ \tag{3.23}$$

و

$$[L_-, L_z] = \hbar L_- \tag{3.24}$$

و

$$[L^2, L_\pm] = 0 \quad [L^2, L_x] = 0, \quad [L^2, L_y] = 0 \quad [L^2, L_z] = 0$$

3.2 مؤثرات كمية الحركة الزاوية المدارية

يُكتب المؤثران الرافع (L_+) والخافض (L_-) في الإحداثيات الكرية في الصورة

$$L_+ = \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{3.25}$$

و

$$L_- = \hbar e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{3.26}$$

ومن الآن فصاعداً نكتب دالة الموجة $Y_{\ell m}$ علي الصورة

$$Y_{\ell m} = |\,\ell m > \tag{3.27}$$

والدالة $Y_{\ell m}^*$ في الصورة

$$Y_{\ell m}^* = <\ell m\,| \tag{3.28}$$

وبدلالة هذا التمثيل تصبح المعادلة (3.12) في الصورة

$$L^2 \,|\, \ell, m >= \hbar^2 \ell(\ell+1) \,|\, \ell, m >$$
$$(3.29)$$
$$L_z \,|\, \ell, m >= m\hbar \,|\, \ell, m >$$

ولإيجاد $L_\pm \,|\, \ell, m >$ نتبع الخطوات التالية:

$$[L_z, L_+] = \hbar L_+$$

وبضـرب طرفـي المعادلـة أعـلاه فـي $|\, \ell, m >$، بعد فك قـوس التبـادل، مـن جهـة اليمين، نحصل علي

$$L_z L_+ |\ell\, m > - L_+ L_z |\ell\, m >= \hbar L_+ |\ell\, m >$$

أو

$$L_z L_+ |\ell\, m >= \hbar L_+ |\ell\, m > + L_+ L_z |\ell\, m >$$

وبم أن $L_z \,|\, \ell, m >= m\hbar \,|\, \ell, m >$ فإن

$$L_z L_+ |\ell\, m >= \hbar(1+m) L_+ |\ell\, m >$$

والآن نكتب المعادلة أعلاه في الصورة

$$L_z (L_+ |\ell\, m >) = \hbar(1+m)(L_+ |\ell\, m >)$$

وتعنـي هـذه المعادلـة أن الدالـة $L_+ \,|\, \ell m >$ هـي دالـة ذاتيـة للمـؤثر L_z بقيمـة ذاتيـة تساوي $\hbar\,(1+m)$. ولكن تنتج هذه القيمة الذاتيـة أيضـا من تـأثير المؤثر L_z علـى الدالة الذاتية $|\, \ell, m+1 >$، أي

$$L_z \,|\, \ell\,, m+1 >= (m+1)\hbar \,|\, \ell\, m > \qquad (3.30)$$

ونلاحظ أن الدالتين $|\, \ell, m+1 >$ و $L_+ \,|\, \ell\, m >$ لـهما نفس القيمـة الذاتيـة، ويتطلب هذا أن تكون الدالتان متناسبتين طردياً، أي

$$L_+ \,|\, \ell, m> \;\; \propto \;\; |\, \ell, m+1>$$

ومنها نكتب العلاقة أعلاه في الصورة

$$L_+ \,|\, \ell, m> = C \,|\, \ell, m+1> \qquad (3.31)$$

حيث C ثابت التناسب. وبنفس الطريقة نجد أن

$$L_- \,|\, \ell, m> = B \,|\, \ell, m-1> \qquad (3.32)$$

حيث B ثابت التناسب. والآن بأخذ المرافق لطرفي المعادلة (3.31) نجد أن

$$< \ell, m \,|\, L^+{}_+ = < \ell, m \,|\, L_- = C^* < \ell, m+1 \,| \qquad (3.33)$$

وبضرب المعادلة (3.33) في (3.31) نحصل على

$$< \ell, m \,|\, L_- L_+ \,|\, \ell, m> = CC^* < \ell, m+1 \,|\, \ell, m+1> = |\, C \,|^2$$

وذلك باعتبار أن $|\, \ell, m+1>$ دالة مُعّايرة، أي

$$< \ell, m+1 \,|\, \ell, m+1> = 1$$

ومن المعادلة (3.20) نجد أن

$$\begin{aligned}
&< \ell, m | L^2 - L_z^2 - \hbar L_z | \ell, m> \\
&= < \ell, m | L^2 | \ell, m> - < \ell, m | L_z^2 | \ell, m> - \hbar < \ell, m | L_z | \ell, m> \\
&= \left[\hbar^2 \ell(\ell+1) - m^2 \hbar^2 - \hbar^2 m\right] < \ell, \mathrm{m} \,|\, \ell, \mathrm{m}> \\
&= (\ell^2 - m^2 + \ell - m)\hbar^2 < \ell, m | \ell, m> = (\ell^2 - m^2 + \ell - m)\hbar^2 \\
&= |C|^2
\end{aligned}$$

و منها نجد أن

$$|\, \mathrm{C} \,|^2 = \hbar^2 (\ell^2 - m^2 + \ell - m)$$

أو

$$|\, C \,| = \hbar \sqrt{(\ell - m)(\ell - m + 1)} \;\; = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m+1)}$$

وعليه تصبح المعادلة (3.31) في الصورة

$$L_+ \mid \ell, m >= \hbar\sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} \mid \ell, m+1 >$$

وبالمثل نجد من المعادلة (3.32) أن

$$L_- \mid \ell, m >= \hbar\sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} \mid \ell, m-1 >$$

حيث $= \hbar\sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)}$ $\mid B \mid = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}$. وعموماً نكتب

$$L_\pm \mid \ell, m >= \hbar\sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)} \mid \ell, m \pm 1 >$$

نلاحظ أن الدالة $\mid \ell, m >$ ليست دالة ذاتية للمؤثرين $L_\pm$ وذلك لأن الحالـة النهائيـة قد تغيرت. ويظهر ذلك من أن قوس التبـادل $[L_z, L_\pm] \neq 0$ وبذلك لا تكون الدالـة الذاتية للمؤثر L_z و $L_\pm$ مشتركة. لمعرفة تـأثير L_x, L_y علـى الدالـة $\mid \ell, m >$ نتبـع الخطوات التالية

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-), \quad L_y = \frac{i}{2}(L_+ - L_-)$$

فيكون $L_x \mid \ell, m >= \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \mid \ell, m >$ و $L_y \mid \ell, m >= \frac{i}{2}(L_+ - L_-) \mid \ell, m >$.

<u>تـمرين:</u>

(أ) أثبت أن

$$L_- \mid \ell, m >= \sqrt{\hbar(\ell + m)(\ell - m + 1)} \mid \ell, m-1 >$$

مبتدئا بالمعادلات (3.18) و (3.22) و (3.31).

(ب) أوجد $L_x \mid \ell, m >, L_y \mid \ell, m >$ ثم بيّن أن $\mid \ell, m >$ ليست دالـة ذاتيـة للمؤثرين L_x, L_y.

3.2.1 مصفوفة المؤثرات L_z و $L_\pm$ و L_x و L_y و L^2

لإيجـاد عناصـر مصـفوفة (matrix-elements) أي مـؤثر تلزمننـا معرفـة القواعد (basis) الأساسية للتمثيل الذي نريد أن تكتب فيه المؤثر. فمثلاً لإيجـاد عناصر مصفوفة A في القواعد $|m>$ ، أي A_{mn} نكتب عناصـر المصـفوفة في الصورة العامة

$$A_{mn} =< m | A | n > \qquad (3.34)$$

(1) مصفوفة L_z:

تُكتب عناصر مصفوفة المؤثر L_z في القواعد $|\ell,m>$ في الصورة

$$< \ell', m' | L_Z | \ell, m > \qquad (3.35)$$

وبإستخدام المعادلة $L_z | \ell m >= m\hbar | \ell m >$ ، نجد أن

$$< \ell',m' | L_Z | \ell,m >= m\hbar < \ell',m' | \ell,m >= m\hbar\delta_{m,m'}\delta_{\ell,\ell'} \qquad (3.36)$$

وبم أن ℓ تكون ثابتة لكل قيم m سنكتب الدالة $| \ell m >=|m >$. فمثلاً إذا كـان $\ell = 1$ فإن $m = 1,0,-1$ (ثلاثة قيم $2\ell + 1 = 2\times 1 + 1 = 3$). ونكتـب القواعد لهذه الحالـة في الصورة

$$|1 > , | 0 >,| -1 >$$

وتكون مُعّايرة إذا كانت متساوية

$$<1 | 1 >= < 0 | 0 >=< -1| -1 >= 1$$

ومتعامدة إذا كانت مختلفة

$$<1 | 0 >= <1 | -1 >=< -1| 0 >= 0$$

وتمثل هذه القواعد متجهات الوحدة الأساسية. ويمكن كتابة هذه القواعد في الصورة العامة

$$|1>=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix} \quad و \quad |0>=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix} \quad و \quad |-1>=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

وتأخذ عناصر مصفوفة L_z الصورة

$$<m'|L_z|m>=m\hbar\delta_{m,m'}=\begin{cases}m\hbar & m=m'\\ 0 & m\neq m'\end{cases} \tag{3.37}$$

لعناصـــر القطـــر يكـــون $m=m'$ حيـــث $m,m'=1,0,-1$ وللعناصـــر الأخـــرى تكون $m\neq m'$. والآن تصبح مصفوفة L_z في الصورة العامة

$$L_z=\begin{pmatrix}<1|L_z|1> & <1|L_z|0> & <1|L_z|-1>\\ <0|L_z|1> & <0|L_z|0> & <0|L_z|-1>\\ <-1|L_z|1> & <-1|L_z|0> & <-1|L_z|-1>\end{pmatrix}$$

أو

$$L_z=\begin{pmatrix}\hbar & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\hbar\end{pmatrix}=\hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix} \tag{3.38}$$

(2) مصفوفة L_+ و L_-:

تُعطي عناصر مصفوفة المؤثر L_+ بالمعادلة

$$<\ell,m'|L_+|\ell,m>=\hbar\sqrt{(\ell-m)(\ell+m+1)}<\ell,m'|\ell,m+1> \tag{3.39}$$

وبـم أن قيمـة ℓ تكـون ثابتـة لكـل قـيم m سـنكتب الدالـة $|\ell,m>$ فـي الصـورة $|\ell,m>=|m>$، وبالتالي تصبح المعادلة أعلاه في الصورة

$$< m' | L_+ | m >= \hbar\sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} < m' | m + 1 > \tag{3.40}$$

أو

$$< m' | L_+ | m >= \hbar\sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)}\ \delta_{m', m+1} \tag{3.41}$$

وتأخذ الآن مصفوفة L_+ الشكل

$$L_+ = \begin{pmatrix} <1|L_+|1> & <1|L_+|0> & <1|L_+|-1> \\ <0|L_+|1> & <0|L_+|0> & <0|L_+|-1> \\ <-1|L_+|1> & <-1|L_+|0> & <-1|L_+|-1> \end{pmatrix} \tag{3.42}$$

نجد من المعادلة (3.41) أن

$$<1|L_+|1>= \hbar\sqrt{(1-1)(1+1+1)}\ \delta_{1,2} = 0$$

$$<1|L_+|0>= \hbar\sqrt{(1-0)(1+0+1)}\ \delta_{1,1} = \sqrt{2}\ \hbar$$

$$<1|L_+|-1>= \hbar\sqrt{(1+1)(1-1+1)}\ \delta_{1,0} = 0$$

$$<0|L_+|1>= 0$$

$$<0|L_+|0>= \hbar\sqrt{(1-0)(1+0+1)}\ \delta_{0,1} = 0$$

$$<0|L_+|-1>= \hbar\sqrt{(1+1)(1-1+1)}\ \delta_{0,0} = \sqrt{2}\ \hbar$$

$$<-1|L_+|1>= \hbar\sqrt{(1-1)(1-1+1)}\ \delta_{-1,0} = 0$$

$$<-1|L_+|0>= \hbar\sqrt{(1-0)(1+0+1)}\ \delta_{-1,1} = 0$$

وبالتالي تصبح مصفوفة L_+ في الصورة

$$L_+ = \begin{pmatrix} 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

أو

$$L_+ = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

وبالمثل تكون مصفوفة عناصر L_- علي الصورة

$$< m' \mid L_- \mid m >= \hbar\sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} \;\; \delta_{m', m-1} \quad (3.44)$$

وتأخذ مصفوفة L_- الشكل التالي

$$L_- = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

الجدير بالذكر أن $L_- = L_+^+$ وبالتالي يمكن أن نحصل علي L_- من مدورة (transpose) مصفوفة L_+ مع أخذ المرافق لكل عنصر فيها.

(3) مصفوفة L_x و L_y:

لإيجاد مصفوفة L_x و L_y نستعمل التعريف $L_\pm = L_x \pm iL_y$ ، ومنه نجد أن

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \quad (3.46)$$

$$L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-) \quad (3.47)$$

وبإستخدام المصفوفتين L_-, L_+ أعلاه نجد أن

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

و

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

ولإيجاد مصفوفة L^2 نستخدم المعادلة

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad (3.50)$$

وبالتعويض عن مصفوفات L_x, L_y, L_z نجد أن

$$L^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}$$

نلاحظ أن مصفوفة L_z و L^2 قطرية (Diagonal). وتمثل عناصر القطر لكل عنصر القيم الذاتية لذلك للمؤثر. يمكن كتابة المؤثر L^2 علي الصورة

$$L^2 = 0\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 6\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

حيث

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{و} \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{و} \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

وهي الدوال الذاتية (القواعد الأساسية) للمؤثر L^2. وبالمثل نجد L_z يمكن كتابته في الصورة

$$L_z = (0\hbar) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + (1\hbar) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (-\hbar) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ونلاحظ أن L_z و L^2 لهما نفس الدوال الذاتية وسبب ذلك أنهما متوافقان، أي أن $[L^2 , L_z] = 0$ ويعني ذلك من الناحية الفيزيائية أنّه من الممكن قياسهما في نفس اللحظة (آنياً). وعموماً يمكن كتابة الدالة الذاتية $|\psi>$ في الصورة

$$|\psi >= c_1 |\psi_1 > +c_2 |\psi_2 > +c_2 |\psi_2 >$$

حيث $|\psi_1 >,|\psi_2 >,|\psi_3 >$ هي القواعد الأساسية التي توصف بها الدالة (المتجه). ونكتب هذه القواعد في الصورة

$$|\psi_1 >= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |\psi_2 >= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |\psi_3 >= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

وبالتالي نجد أن

$$|\psi >= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

أو

$$|\psi >= \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

ويُعطي متوسط الكمية الفيزيائية A التي مؤثرها $\hat{A}$ لمنظومة في الحالة $|\psi>$ بالمعادلة

$$< A >=< \psi | \hat{A} | \psi > \tag{3.51}$$

ويعُطي الخطأ (اللاتحديد) في قياس الكمية A بالمعادلة

$$\Delta A = \sqrt{< A^2 > - < A >^2} \tag{3.52}$$

ويُعطي إحتمال وجود المنظومة في الحالة $|\varphi>$ بالمعادلة

$$P = |<\varphi|\psi>|^2 \tag{3.53}$$

ويُعطي تغير متوسط الكمية الفيزيائية A بالمعادلة

$$\frac{d}{dt}<A> = \frac{1}{i\hbar}<[\hat{A},\hat{H}]> + \frac{\partial<\hat{A}>}{\partial t} \tag{3.54}$$

حيث $\hat{H}$ هو مؤثر هاملتون للمنظومة.

<u>مثال(2)</u>

(أ) أوجد مصفوفة (مؤثر) كمية الحركة الزاوية المدارية لجسيم كمية حركته الكلية تساوي $\sqrt{6}\,\hbar$.

(ب) مستخدماً تكميم كمية الحركة الزاوية أوجد القيم الذاتية لكل مصفوفة.

(ج) أحسب الدوال الذاتية لـ L_x التي تقابل اكبر قيمة ذاتية.

(د) إذا علمنا أن الجسيم موجوداً في الحالة الذاتية لـ L_x التي لها أكبر قيمة ذاتية. فإذا تم قياس كمية الحركة في إتجاه z، فما هو إحتمال الحصول علي كل قيمة من هذه القياسات؟

<u>الحل</u>

(أ) تُعطي كمية الحركة الزاوية بالمعادلة $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ وبالمقارنة نجد أن $\sqrt{6}\,\hbar = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)}$ ومنها نحصل علي $\ell^2+\ell-6=0$ أو $(\ell+3)(\ell-2)=0$ التي تُعطي القيمة $\ell=2$ بم أن $\ell=-3$ مستبعدة لأن $\ell>0$. ويكون عدد الحالات هو $2\ell+1=2(2)+1=5$. ونمثل هذه الحالات بـ $|\ell,m>$ وبم أن $\ell=2$ فإن $m=2,1,0,-1,-2$ وبالتالي تصبح الحالات

$$|2,2>\text{ و }|2,1>\text{ و }|2,0>\text{ و }|2,2>\text{ و }|2,-1>\text{ و }|2,-2>$$

ويمكن تمثيل هذه الحالات بالمتجهات (القواعد) التالية

$$|2,2>=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |2,1>=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\0\end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |2,0>=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\end{pmatrix} \quad \text{و} \quad |2,-1>=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\\0\end{pmatrix} \quad \text{و}$$

$$|2,-2>=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

وفى هذه القواعد تأخذ مصفوفة L_z الشكل التالي

$$L_z=\hbar\begin{pmatrix}2&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&-1&0\\0&0&0&0&-2\end{pmatrix}$$

ولكي نوجد مصفوفة L_x و L_y تلزمنا معرفة L_+ و L_- وذلك لأن

$$L_x=\frac{1}{2}(L_+ + L_-) \quad ، \quad L_y=\frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$$

ونعلم أن

$$L_\pm|\ell,m>=\hbar\sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)}\,|\ell,m\pm 1>$$

وبالتالي نجد أن

$$L_+|2,2>=\hbar\sqrt{(2-2)(2+2+1)}\,|2,3>=0$$

$$L_{+}\,|\,2,1>=\hbar\sqrt{(2-1)(2+1+1)}\,|\,2,2>=2\,\hbar\,|\,2,2>$$

$$L_{+}\,|\,2,0>=\hbar\sqrt{(2-0)(2+0+1)}\,|\,2,1>=\sqrt{6}\,\hbar\,|\,2,1>$$

$$L_{+}\,|\,2,-1>=\hbar\sqrt{(2+1)(2-1+1)}\,|\,2,0>=\hbar\sqrt{6}\,|\,2,0>$$

$$L_{+}\,|\,2,-2>=\hbar\sqrt{(2+2)(2-2+1)}\,|\,2,-1>=2\hbar\,|\,2,-1>$$

ولإيجاد عناصر المصفوفة فإن

$$L_{+}=\begin{pmatrix} <2,2|L_{+}|2,2> & <2,2|L_{+}|2,1> & <2,2|L_{+}|2,0> & <2,2|L_{+}|2,-1> & <2,2|L_{+}|2,-2> \\ <2,1|L_{+}|2,2> & <2,2|L_{+}|2,1> & <2,2|L_{+}|2,0> & <2,2|L_{+}|2,-1> & <2,2|L_{+}|2,-2> \\ <2,0|L_{+}|2,2> & <2,2|L_{+}|2,1> & <2,2|L_{+}|2,0> & <2,2|L_{+}|2,-1> & <2,2|L_{+}|2,-2> \\ <2,-1|L_{+}|2,2> & <2,2|L_{+}|2,1> & <2,2|L_{+}|2,0> & <2,2|L_{+}|2,-1> & <2,2|L_{+}|2,-2> \\ <2,-2|L_{+}|2,2> & <2,2|L_{+}|2,1> & <2,2|L_{+}|2,0> & <2,2|L_{+}|2,-1> & <2,2|L_{+}|2,-2> \end{pmatrix}$$

وبإستخدام المعادلة (3.41) وحقيقة أن

$$<2,2\,|\,2,2>=<2,1\,|\,2,1>=<2,0\,|\,2,0>=....=1$$

و

$$<2,2\,|\,2,1>=<2,1\,|\,2,0>=<2,-1\,|\,2,0>=....=0$$

نحصل علي

$$L_{+}=\hbar\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ويمكن أن نحصل علي مصفوفة L_{-} بالطريقة الأولى بنفس طريقة L_{+} أعلاه أو الطريقة الثانية من مدوّرة L_{+} ومن ثم اخذ المرافق لكل عنصر حيث $L_{-}=L_{+}^{+}$.

وتصبح مصفوفة L_{-} علي النحو التالي

$$L_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

والآن من المعادلتين (3.46) و (3.47) نجد أن مصفوفتي L_x و L_y هما علي الترتيب

$$L_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

و

$$L_y = \frac{\hbar}{2i}\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \end{pmatrix}$$

(ب) نجد أن القيم الذاتية لـ L_z هي $m\hbar$ أو $2\hbar,\hbar,0,-\hbar,-2\hbar$. ويمكن أن نحصل من معادلة القيمة الذاتية لمؤثر L_z أعلاه، أي $L_z|\psi\rangle = a|\psi\rangle$. وبنفس الكيفية تكون القيم الذاتية لـ L_x و L_y هي $2\hbar,\hbar,0,-\hbar,-2\hbar$.

(ج) لإيجاد الدالة الذاتية لأكبر قيمة ($2\hbar$) نرمز للحالة التي لها أكبر قيمة لـ L_z، أي $2\hbar$، بالرمز $|\varphi\rangle$. ويمكن كتابة هذه الحالة علي الصورة العامة

$$|\varphi>=\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix}$$

ومن ثم نوجد الدوال الذاتية من معادلة القيمة الذاتية التالية

$$L_x\,|\,\varphi>=2\hbar\,|\,\varphi>$$

أو

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix}=2\hbar\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix}$$

ومن هذه المصفوفة نحصل علي مجموعة المعادلات التالية

$$-2a+b=0$$

$$a-2b+\sqrt{\frac{3}{2}}\,c=0$$

$$\sqrt{\frac{3}{2}}b-2c+\sqrt{\frac{3}{2}}\,d=0$$

$$\sqrt{\frac{3}{2}}c-2d+e=0$$

$$d-2e=0$$

من المعادلـة الأولـى والأخيـرة نجـد أن $b=2a$ و $d=2e$ وبتعـويض $b=2a$ فـي المعادلـة الثانيـة نحصـل علـي $c=\sqrt{6}\,a$ وبتعويض $d=2e$ فـي المعادلـة الرابعـة

نحصل علي $c=\sqrt{6}\,e$. ومن ثم نجد أن $e=a$ و $d=2a$. وبتعويض هذه القيم في المعادلة أعلاه نحصل علي

$$|\varphi>=a\begin{pmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{pmatrix}$$

ونحصل علي قيمة a من شرط المُعّايرة $<2,+2|2,+2>=1$ لنحصل علي $a=\frac{1}{4}$. وتصبح المعادلة أعلاه في الصورة

$$|\varphi>=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\0\end{pmatrix}+\frac{\sqrt{6}}{4}\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\\0\end{pmatrix}+\frac{1}{4}\begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

أو

$$|\varphi>=\frac{1}{4}|2,2>+\frac{1}{2}|2,1>+\frac{\sqrt{6}}{4}|2,0>+\frac{1}{2}|2,-1>+\frac{1}{4}|2,-2>$$

(د) يُعطي إحتمال وجود الجسيم P_i ، إذا كان الجسيم في البدء موجوداً في الحالة $|\psi>\equiv|2,+2>$، إذا قسنا L_z بالعلاقات التالية:

(i) الحالة التي لها قيمة ذاتية لـ L_z تساوي $2\hbar$ هي: $P_2=|<2,2|\psi>|^2=\frac{1}{16}$.

(ii) الحالة التي لها قيمة ذاتية لـ L_z تساوي $\hbar$ هي: $P_1=|<2,1|\psi>|^2=\frac{1}{4}$.

(iii) الحالة التي لها قيمة ذاتية لـ L_z تساوي 0 هي: $P_0 = |<2,0|\psi>|^2 = \frac{3}{8}$.

(iv) الحالة التي لها قيمة ذاتية لـ L_z تساوي $-\hbar$ هي: $P_{-1} = |<2,-1|\psi>|^2 = \frac{1}{4}$.

(v) الحالـــة التـــي لهـــا قيمـــة ذاتيـــة لـــ L_z تســـاوي $-2\hbar$ هـــي: $P_{-2} = |<2,-2|\psi>|^2 = \frac{1}{16}$.

تذّكر أن مجموع الإحتمالات الكلي يساوي الوحدة. وكما نعلم أن الدالة

$$|\psi> = c_1|\psi_1> + c_2|\psi_2> + c_2|\psi_2> + c_2|\psi_4>$$

تعنـي بـأن $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + |c_4|^2 = 1$ ويُعطـي $|c_1|^2$ إحتمـال وجـود الجسيم في الحالة $|\psi_1>$ و $|c_2|^2$ في الحالة $|\psi_2>$ و هكذا ...

3.3 كمية الحركة الزاوية الغزلية (Spin Angular Momentum)

وجد العالمان قود سميث وألن بك من تجربتهما الشهيرة أن للإلكترون كمية حركة زاوية غزلية لا تعتمد على فضاء الجسيم (x, y, z)، بل هي كمية ذاتية ترتبط بالجسيم فقط. ولقد وُجد أن كمية الحركة الزاوية الغزلية (S) تخضع لنفس قوانين كمية الحركة الزاوية المدارية (L). يرمز للحالة العامة للجسيم بالدالة $|s, m_s>$ بالمقارنة مع الحالة السابقة للحركة المدارية حيث إستخدمنا الدالة $|\ell, m>$. وبم أن هنالك عدة أوصاف لـ m نستعمل الدليل m_ℓ للحركة المدارية السابقة و m_s للحركة الغزلية.

والآن نكتب مركبات المؤثر S علي الصورة S_x , S_y , S_z التي تحقق أقواس التبادل التالية (علي غرار كمية الحركة الزاوية المدارية L):

$$[S_x , S_y] = i\hbar S_z \quad \text{و} \quad [S_y , S_z] = i\hbar S_x \quad \text{و} \quad [S_z , S_x] = i\hbar S_y \quad (3.55)$$

و

$$[S^2 , S_x] = [S^2 , S_y] = [S^2 , S_z] = 0 \qquad (3.56)$$

وكذلك

$$[S^2 , S_+] = [S^2 , S_-] = 0 \qquad (3.57)$$

حيث

$$S_\pm = S_x \pm iS_y \qquad (3.58)$$

ونجد أن مربع كمية الحركة الزاوية الغزلية

$$S^2 | s , m_s >= \hbar^2 s(s+1) | s , m_s > \qquad (3.59)$$

ومركبة كمية الحركة الزاوية الغزلية في إتجاه المحور z

$$S_z | s , m_s >= \hbar\, m_s) | s , m_s > \qquad (3.60)$$

و

$$S_+ | s , m_s >= \hbar\sqrt{(s-m_s)(s+m_s+1)}\, | s , m_s > \qquad (3.61)$$

و

$$S_- | s , m_s >= \hbar\sqrt{(s+m_s)(s-m_s+1)}\, | s , m_s > \qquad (3.62)$$

مثال (3):

أوجد الحالات الممكنة لإلكترون له $s = \frac{1}{2}$ في الصورة العامة $| s,m_s >$. ومن ثم أوجد مصفوفة المؤثرات التالية

$$S^2 ,\ S_z ,\ S_+ ,\ S_- , S_x , S_y$$

في القواعد $| s,m_s >$.

الحل

إذا كان $s=\frac{1}{2}$ فإن قيم m_s تتـرواح بـين s و $-s$ ، أي $m_s=+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$. وتكون الحالات هي:

$$|\frac{1}{2},+\frac{1}{2}>\equiv|+>\equiv|\uparrow> \quad \text{و} \quad |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>\equiv|->\equiv|\downarrow>$$

مصفوفة S_z:

تُعطي مصفوفة S_z بالمعادلة التالية

$$<s',m'_s|S_z|s,m_s>=\hbar\, m_s\delta_{s,s'}\delta_{m_s,m'_s}$$

وبم أن القيم الذاتية لـ S_z لا تعتمد علـى s مباشرة بل علـي قيم m_s، يمكن كتابـة الدالة $|s,m_s>$ اختصـاراً في الصـورة $|s,m_s>=|m_s>$. وتصـبح المعادلـة أعلاه في الصورة

$$<m'_s|S_z|m_s>=\hbar\, m_s\delta_{m_s,m'_s}=\begin{cases}\hbar\, m_s & m_s=m'_s\\ 0 & m_s\neq m'_s\end{cases}$$

أو

$$S_z=\begin{pmatrix}<+|S_z|+> & <+|S_z|-> \\ <-|S_z|+> & <-|S_z|->\end{pmatrix}$$

وبالتعويض عن قيم هذه العناصر بالمقادير التالية:

$$<+|S_z|+>=\frac{\hbar}{2} \quad \text{و} \quad <-|S_z|->=-\frac{\hbar}{2} \quad \text{و} \quad <+|S_z|->=<-|S_z|+>=0$$

تأخذ مصفوفة S_z الشكل

$$S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

وتُعطي عناصر مصفوفة S_+ بالمعادلة

$$<m'_s | S_+ | m_s >= \hbar \sqrt{(s-m_s)(s+m_s+1)}\ \delta_{m_s, m'_s+1}$$

ومنها نحصل على المصفوفة في الشكل التالي

$$S_+ = \begin{pmatrix} <+|S_+|+> & <+|S_+|-> \\ <-|S_+|+> & <-|S_+|-> \end{pmatrix}$$

حيث

$$<+|S_+|+>=0 \text{ و } <-|S_+|+>=0 \text{ و } <-|S_+|->=0$$

$$<+|S_+|->=\hbar\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)}\ \delta_{+,+} = \hbar$$

وبالتعويض في المصفوفة أعلاه نحصل على مصفوفة S_+ علي الصورة

$$S_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

وبالمثل نجد أن مصفوفة S_- هي

$$S_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ويمكن أن نحصل علي مصفوفة S_- من مدورة (Transpose) مصفوفة S_+ مع اخذ المرافق لكل عناصر المصفوفة. ولإيجاد مصفوفة S_x و S_y نستعمل مؤثر المغزل الرافع (S_+) والخافض (S_-) حيث $S_\pm = S_x \pm iS_y$ ومنها نجد أن

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$$

$$S_y = \frac{i}{2}(S_- - S_+)$$

وبالتعويض عن مصفوفة S_+ و S_- نحصل علي

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

و

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

وأخيراً تُعطي مصفوفة S^2 من المعادلة $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$. وبالتعويض عن مصفوفة S_x^2 و S_y^2 و S_z^2 نحصل علي

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ومن هذه المصفوفات نُعّرف مصفوفات باولي (Pauli) الشهيرة (σ_i)، التي ترتبط بمصفوفات المغزل S_i بالعلاقة $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ ، علي النحو التالي

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

وتلعب هذه المصفوفات دورا هاما في ميكانيكا الكم. وهي مؤثرات هيرميتية $\sigma_i^+ = \sigma_i$ ويكون مجموع عناصر أقطارها (trace) صفراً. وتحقق هذه المصفوفات أقواس التبادل التالية

$$[\sigma_j \, , \sigma_k] = i\varepsilon_{jk\ell}\sigma_\ell$$

و

$$\sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j \equiv \{\sigma_j \, , \sigma_k\} = 2\delta_{j,k}$$

حيـــث $\sigma_i^2 = 1$ ، $j,k,\ell = x,y,z$ و $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ ، $\sigma_y\sigma_z = i\sigma_x$ ، $\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y$ و $\varepsilon_{xyz} = +1 \, , \, \varepsilon_{xxz} = \varepsilon_{xyy} = 0 \, , \, \varepsilon_{xyz} = -\varepsilon_{yxz}$ (يُعـــرف بممتـــد ليفـــي-شـــيفيتا الــــلا متجانس).

تمرين:

(أ) تأكد من أن مصفوفات باولي هيرميتية وأنها تحقق أقواس التبادل التالية

$$[\sigma_x \, , \sigma_y] = i\sigma_z \quad \text{و} \quad [\sigma_y \, , \sigma_z] = i\sigma_x \quad \text{و} \quad [\sigma_z \, , \sigma_x] = i\sigma_y$$

و

$$\{\sigma_x \, , \sigma_y\} = 0 \quad \text{و} \quad \{\sigma_x \, , \sigma_z\} = 0 \quad \text{و} \quad \{\sigma_y \, , \sigma_z\} = 0$$

(ب) أكتب مؤثر هاملتون ثم أوجد معادلات الحركة لمؤثر كمية الحركة الزاوية الغزلية،علماً بأن مؤثرات باولي هي:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

إذا كـان عنـد $t = 0$ يوصـف الجسـيم بالدالـة $\chi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. أوجـد إحتمـال أن يُعطي قياس المغزل في إتجاه y القيمة $-\frac{\hbar}{2}$ عند اللحظة t.

3.4 كمية الحركة الزاوية الكلية (Total Angular Momentum)

قد تحدث في بعض الحـالات أن تكون كميـة الحركـة الزاويـة المداريـة (L) أو الغزلية (S) غير محافظـة نتيجـة لوجود تفاعل خـارجي مع الجسيم. وفـي هذه الحالة نجد أن كمية الحركة الكلية هي التـي تكون محافظـة أثنـاء حركـة الجسيم. وتُعطي كمية الحركة الزاويـة الكليـة كحاصـل الجمع لـ L و S حيث نكتب ذلك علي الصورة التالية

$$J = L + S \tag{3.63}$$

وينتج مؤثر كمية الحركة الزاوية الكلية J تأثيرات مشابهة علي الدوال كالتي حصلنا عليها لـ L و S سابقا. ففي قواعد J نكتب الحالة العامة في الصورة $|\, j\, m_j >$ حيث تأخذ m_j القيم $j, j-1, ..., -j$ وتُعرف m_j بعدد الكم المغناطيسي الكلي. ويُعطي عدد هذه الحالات الكلية بـ $(2j+1)$. وعلي غرار L و S نجد أن

$$J_z \,|\, j\, m_j >= \hbar m_j \,|\, j\, m_j > \tag{3.64}$$

و

$$J^2 \,|\, j\, m_j >= \hbar^2 j(j+1) \,|\, j\, m_j > \tag{3.65}$$

حيث

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{3.66}$$

وتحقق أقواس التبادل بين مركبات J العلاقات التالية

$$[J_z \,,\, J_x] = i\hbar J_y \quad \text{و} \quad [J_y \,,\, J_z] = i\hbar J_x \quad \text{و} \quad [J_x \,,\, J_y] = i\hbar J_z \tag{3.67}$$

وكذلك

$$[J^2 ,\ J_x] = [J^2 ,\ J_y] = [J^2 ,\ J_z] = 0 \qquad (3.68)$$

و

$$[J^2 ,\ J_+] = [J^2 ,\ J_-] = 0 \qquad (3.69)$$

مثال (4):

أوجد الدوال (القواعد) بدلالة $|\, j\, m_j >$ إذا كان $j=1$ ومن ثم أوجد مصفوفة المؤثرات

$$J_z \ , J_+ \ , J_- \ , J_x \ , J_y$$

بم أن $j=1$ فإن عدد الحالات تساوي $3=(2j+1)$ والحالات هي:

$$|1,-1> \text{،} \ |1,0> \ \text{،} \ |1,+1>$$

حيث تأخذ m_j القيم $m_j = 1, 0, -1$.

مصفوفة J_z:

تُعطي مصفوفة J_z من المعادلة

$$< j'\ m'_j \,|\, J_z \,|\, j\ m_j >= \hbar m_j < j'\ m'_j \,|\, j\ m_j >= \hbar m_j \delta_{j,j'} \delta_{m_j ,m'_j}$$

وبم أن مصفوفة J_z تعتمد فقط علي قيمة m_j من الأفضل أن نكتب القواعد $|\, m_j >=|\, j, m_j >$، وبالتالي تصبح المعادلة أعلاه في الصورة

$$< m'_j \,|\, J_z \,|\, m_j >= \hbar m_j < m'_j \,|\, m_j >= \hbar m_j \delta_{m_j ,m'_j}$$

وتمثل مصفوفة J_z والتي تكتب في الصورة

$$J_z = \begin{pmatrix} <1|J_z|1> & <1|J_z|0> & <1|J_z|-1> \\ <0|J_z|1> & <0|J_z|0> & <0|J_z|-1> \\ <-1|J_z|1> & <-1|J_z|0> & <-1|J_z|-1> \end{pmatrix}$$

وبحساب قيم كل عنصر نحصل علي المصفوفة

$$J_z = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

أو

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ونلاحظ أن مصفوفة J_z قطرية (Diagonal). وهو الحال لكل مركبات z لكمية الحركة الزاوية (S, L).

مصفوفة J_+ و J_-:

تُعطي عناصر مصفوفة J_+ بالمعادلة

$$< j'\, m'_j \,|\, J_+ \,|\, j\, m_j >= \hbar\sqrt{(j-m_j)(j+m_j+1)} < j'\, m'_j \,|\, j\, m_j+1 >$$

وبإستخدام القواعد $|\, j, m_j > = |\, m_j >$ حيث $j=1$ في كل القواعد، تصبح المعادلة في الصورة

$$< m'_j \,|\, J_+ \,|\, m_j >= \hbar\sqrt{(j-m_j)(j+m_j+1)} < m'_j \,|\, m_j+1 >$$

$$< m'_j \,|\, J_+ \,|\, m_j >= \hbar\sqrt{(j-m_j)(j+m_j+1)}\ \delta_{m'_j, m_j+1}$$

ويمكن كتابتها في شكل المصفوفة التالية

$$J_+ = \begin{pmatrix} <1|J_+|1> & <1|J_+|0> & <1|J_+|-1> \\ <0|J_+|1> & <0|J_+|0> & <0|J_+|-1> \\ <-1|J_+|1> & <-1|J_+|0> & <-1|J_+|-1> \end{pmatrix}$$

أو

$$J_x = \begin{pmatrix} 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

أو

$$J_+ = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

وبالمثل تكون مصفوفة J_- في الشكل التالي

$$J_- = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ويمكن أن نحصل عليها أيضا من مدورة L_+ مع اخذ المرافق لكل عنصر في المدورة.

مصفوفة J_x و J_y:

يمكن أن نجد مصفوفة J_x و J_y من التعريف $J_\pm = J_x + iJ_y$. ويكون

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$$

$$J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$$

ومنهما تكون مصفوفة J_x و J_y، بإستخدام مصفوفة $J_\pm$، علي النحو التالي

$$J_x = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

و

$$J_y = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

وتُعطي مصفوفة J^2 من المعادلة $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ علي النحو التالي

$$J^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

وهي مصفوفة قطرية كما كان الحال لـ S^2 , L^2.

3.5 طريقة جمع كميات الحركة الزاوية

3.5.1 الدوال الذاتية لكمية الحركة الزاوية الغزلية

لقد أوضحنا في الباب السابق كيف انه يمكن إيجاد كل الدوال الذاتية لكمية الحركة الزاوية المدارية والغزلية. ونود هنا أن نحصل علي الدوال الذاتية لذرة مكونة من الإلكترونين لكل منهما كمية حركة زاوية غزلية مستقلة يكون مؤثر مغزل الأولى S_1 والثانية S_2، أي نود أن نوجد الدالة الذاتية المحصلة لمجموع دالتين ذاتيتين لكل إلكترون. وفى مثل هذه الحالات نستخدم تمثيل يكون فيه S^2 و S_z قطرياً، حيث $s = s_1 + s_2$ و $s_z = s_{1z} + s_{2z}$، حيث s_1 هو غزل الإلكترون

الأول و s_2 غزل الإلكترون الثاني و S_z مركبة المغزل في إتجاه المحور z و S_{1z}, S_{2z} هما مركبتي غزل الإلكترونين في إتجاه المحور z.

نجد أن فضاء المؤثر الأول S_1 يتكون من $(2s_1+1)$ والمؤثر الثاني S_2 يتكون من $(2s_2+1)$ دالة ذاتية. تمثل الدالة الذاتية $|s_1, m_{s1}>$ القواعد التي يكون فيها S_1^2, S_{1z} قطريان (diagonal). وبنفس الكيفية تمثل الدالة الذاتية $|s_2, m_{s2}>$ القواعد التي يكون فيها S_2^2, S_{2z} قطريان (diagonal).

وفى هذه الحالة نجد أن الدالة الذاتية المشتركة للمؤثرات $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ هي حاصل ضرب الدالتين الذاتيتين لكل مؤثر، أي $|s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}>=|s_1, m_{s1}>|s_2, m_{s2}>$. ونجد أن المؤثر $S = S_1 + S_2$ يتبادل مع المؤثرات $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$. ولكن لا يتبادل $S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2$ مع المؤثرين S_{1z}, S_{2z} وبالتالي لا تكون الدالة $|s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}>=|s_1, m_{s1}>|s_2, m_{s2}>$ دالة ذاتية للمؤثر S^2، ولكن نجد أن S^2 يتبادل مع S_1^2, S_2^2 و S_z. وفي هذه الحالة تكون الدالة الذاتية لكل من S_z و S^2 مشتركة مع S_1^2, S_2^2، ولكنها لا تكون، على وجه العموم، دالة ذاتية لكل من S_{1z}, S_{2z}. ولهذا السبب يوجد لدينا وصفان مختلفان ومكملان للدالة الذاتية للمنظومة الفيزيائية هما:

(1) عن طريق الدوال الذاتية لكل من $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ وهي $|s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}>$ وهي دوال مُعّايرة ومتعامدة.

(2) عن طريق الدوال الذاتية لكل من S^2, S_1^2, S_2^2, S_z والتي نرمز لها بالرمز $|s, m_s>$ وهي دوال متعامدة ومُعّايرة.

(1) الدالة الذاتية $|s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}>$**:**

نجـــد أن الدالـــة الذاتيـــة $|s_1,s_2,m_{s1},m_{s2}>$ المشـــتركة لكـــل مـــن المؤثرات $S_1^2,S_2^2,S_{1z},S_{2z}$ هي حاصل الضرب للدالتين وبالتالي تكون

$$|s_1,s_2,m_{s1},m_{s2}>=|s_1,m_{s1}>|s_2,m_{s2}> \quad (3.70)$$

وبتأثر هذه المؤثرات علي الدالتين $|s_1,m_{s1}>$ و $|s_2,m_{s2}>$ نجد أن

$$S_1^2|s_1,m_{s1}>=\hbar^2 s_1(s_1+1)|s_1,m_{s1}>$$

$$(3.71)$$

$$S_{1z}|s_1,m_{s1}>=m_{s1}\hbar|s_1,m_{s1}>$$

وكذلك

$$S_2^2|s_2,m_{s2}>=\hbar^2 s_2(s_2+1)|s_2,m_{s2}>$$

$$(3.72)$$

$$S_{2z}|s_2,m_{s2}>=m_{s2}\hbar|s_2,m_{s2}>$$

مثال (5):

خـذ الـدوال $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}>$ و $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>$ و $|2,1>$ فـي الصـورة $|s,m_s>$، أوجـد قـيم المؤثرين S^2 و S_z في هذه الحالات.

الحل

نعلم أن

$$S^2|s,m_s>=\hbar^2 s(s+1)|s,m_s>$$

$$S_z|s,m_s>=m_s\hbar|s,m_s>$$

(أ) نجد للدالة $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}>$ أن

$$S^2 |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \hbar^2 \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \tfrac{3}{4}\hbar^2 |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

$$S_z |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \tfrac{1}{2}\hbar |\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

(ب) للدالة $|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$ نجد أن

$$S^2 |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}> = \hbar^2 \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}> = \tfrac{3}{4}\hbar^2 |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

$$S_z |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}> = -\tfrac{1}{2}\hbar |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

(ج) للدالة $|2,1>$ نجد أن

$$S^2 |2,1> = \hbar^2 2(2+1)|2,1> = 6\hbar^2 |2,1>$$

$$S_z |2,1> = \hbar |2,1>$$

(2) الدالة الذاتية $|s_1,s_2,s,m_s>$:

نود هنا أن نُعّرف فضاء جديداً يتكون من s_1,s_2 بحيث أن $s=s_1+s_2$ ومسقطه هـو m_s. يُعـرف هـذا الفضـاء الجديـد بفضـاء حاصـل الضـرب ويكـون بُعده $N=(2s_1+1)(2s_2+1)$. ويحوى هذا الفضاء فضائيات داخليه ذات أبعاد هي علي النحو التالي:

$$N_1 = 2s_1+1, \quad N_2 = 2(s_1+1)+1, \quad N_{2s_2+1} = 2(s_1-s_2)+1 \qquad (2.73)$$

(بفرض أن $s_1 > s_2$) ولجعل مصفوفتي S^2, S_z مصفوفتين قطريتين، يلزمنا أولاً أن نحصـل علـي دوال ذاتيـة آنيـة لكـل مـن المؤثرات $S^2=(S_1+S_2)^2$, $S_z=(S_{1z}+S_{2z})$. والعمل المناط بـه هنا هو التعبير عـن الـدوال الذاتيـة الجديـدة بدلالـة دوال معروفـة مسـبقا ،أي $|s_1,m_{s1}>$،

$|s_2, m_{s2}>$ أو حاصـــــــل ضـــــــربهما علــــــــي الصـــــــــورة $|s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}>=|s_1, m_{s1}>|s_2, m_{s2}>$.

ويمكننا الآن تعريف مؤثر الإسقاط (projection operator) بـ

$$\sum_{m_{s1},m_{s2}} |s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}><s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}| \tag{3.74}$$
$$= \sum_{m_{s1}} |s_1, m_{s1}><s_1, m_{s1}| \sum_{m_{s2}} |s_2, m_{s2}><s_2, m_{s2}| = 1$$

وتُمثل الدوال الذاتية الجديدة بـ $|s_1, s_2, s\, m_s>$ حيث أن

$$S^2 |s_1, s_2, s\, m_s>= \hbar^2 s(s+1)|s_1, s_2, s\, m_s> \tag{3.75}$$
$$S_z |s_1, s_2, s\, m_s>= \hbar m_s |s_1, s_2, s\, m_s>$$

ويمكن كتابة هذه الـدوال الجديدة بدلالة الدوال الذاتية القديمة $|s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2}>$ وذلك بإستخدام مؤثر الإسقاط أعلاه. وبم أن s_1, s_2 هي أعداد ثابتة لحسابات معينة(specific) فيمكننا حذف هذه الأعداد من هذا الترميز لتصبح الدوال القديمة في الصورة $|m_{s1}, m_{s2}>$. ومن الضروري ملاحظة أن اكبر قيم لـ m_{s1}, m_{s2} هي s_1, s_2 علي الترتيب، وأكبر قيمة لـ m_s هي $m_s = m_{s1} + m_{s2}$ وبالتالي فإن الدوال الجديدة تُكتب في الصورة

$$|s\, m_s>= \sum_{m_s = m_{s1} + m_{s2}} |m_{s1}, m_{s2}><m_{s1}, m_{s2}|s\, m_s> \tag{3.76}$$

نلاحظ أن ($<m_{s1}, m_{s2}|s\, m_s>$) كميات قياسية (scalar) وما هي إلا معاملات مقدار ما يسهم بـه كل حد من الدوال الذاتيـة القديمـة $|m_{s1}, m_{s2}>$ للحد الجديد $||s\, m_s>$. ونجد أن $<m_{s1}, m_{s2}|s\, m_s>=0$ إذا كان $m_s \neq m_{s1} + m_{s2}$. ونعلم كذلك

أن اكبر قيمة لـm_{s1} هي s_1 ولـm_{s2} هي s_2 وبالتـالي تكون اكبر قيمة لـ m_s هي $m_s = s_1 + s_2$. وتُعرف المقادير $< m_{s1}, m_{s2} | s\, m_s >$ بمعـاملات كلبش و قوردون (Clebsch-Gordon Coefficients). ولـيس من الصـعب إيجـاد قيمها لأعداد صغيره لكل من s_1, s_2 ، وتُعطي هذه المعاملات في شكل جداول خاصـة. وسنوضح في ما يلي كيفية إستخدام المؤثرات الرافعة (raising) والخافضة (lowering) فـي حسـاب هذه المعـاملات. وبعد أن نحصـل علـي الدالـة الذاتيـة للغزل، تصبح دالة الموجة الكلية في الصورة العامة

$$\psi =| n,\ell,m_\ell,s,m_s >=| n,\ell,m_\ell >| s,m_s >= \psi_{n,\ell,m_\ell} \chi_{s,m_s} \qquad (3.77)$$

حيث تعتمد ψ_{n,ℓ,m_ℓ} علي الإحداثيات r,θ,φ والتـي حصلنا عليها سابقاً، بينما لا تعتمد χ_{s,m_s} علي r,θ,φ ولكنها تعتمد فقط علي الطبيعة الذاتيـة للجسيم. ونـجد هنـا أن إدخال الغزل في صياغة ميكانيكا الكم تم بطريقة تعميمية. ولكن وجد العـالم ديراك أن فكرة الغزل تـأتي بطريقـة مباشـرة وذلـك عند دراسـة ميكانيكـا الكم النسبية.

<u>مثال (6):</u>

أوجد الدوال الذاتية $| s, m_s >$ لإلكترونين متطـابقين، معّرفـة فـي فضـاء حاصـل الضرب لـ

$| s_1, m_{s1} >$ و $| s_1, m_{s1} >$، أي $| m_{s1}, m_{s2} >=| s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2} >=| s_1, m_{s1} >| s_2, m_{s2} >$

<u>الحل</u>

بم أن $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ فإن قيم $m_{s1}\,, m_{s2}$ تكون هي $\pm\frac{1}{2}$. وبالتالي تصبح الدوال الذاتية الممكنة هي كل التركيبات لـ$m_{s1}\,, m_{s2}$ وعددها يساوي

$(2s_1+1)(2s_2+1)=(2\times\frac{1}{2}+1)(2\times\frac{1}{2}+1)=4$.

وفي هذه الحالة نستخدم العددين 1 , 2 والدالـة χ لترقيم الجسيمين: $\chi_+(1)$ تعنـى أن الجسيم الأول لـه $m_s=\frac{1}{2}$ (Spin up) والحالـة $\chi_-(2)$ تعنـى أن الجسيم الثاني له $m_s=-\frac{1}{2}$ (Spin down) وهكذا...

وبدلالة الدوال الذاتية $|m_{s_1},m_{s_2}>$ تُكتب هذه في الصورة التالية:

$$|+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>=\chi_+(1)\chi_+(2)$$

$$|+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>=\chi_+(1)\chi_-(2)$$

$$|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>=\chi_-(1)\chi_+(2)$$

$$|-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>=\chi_-(1)\chi_-(2)$$

ويتكون هذا الفضاء من 4 أبعاد (دوال) ، كما هي موضحة أعلاه. ونجد أن قيم s تتـراوح مـن s_1+s_2 الـي $|s_1-s_2|$ وبالتـالي نجـد أن $s=1,0$. ويحـوى هـذا الفضـاء فضـاء داخلياً ثلاثـي مقابـل لــ $s=1$ وبـه $(2s+1)=(2\times1+1)=3$ دالـة ذاتية وفضاء داخلياً آخر مقابل لــ$s=0$ وبـه $(2s+1)=(2\times0+1)=1$ دالـة ذاتيـة. ويصـبح عدد الـدوال الذاتيـة فـي الفضـاء الجديـد (أربعـة دوال) أيضـاً. ونجـد أن الـدوال الذاتية الجديدة تُمثل بـ $|s,m_s>$ حيث $m_s=m_{s1}+m_{s2}$.

(أ) إذا كان $s=1$ فإن $m_s=1,0,-1$ وبالتالي تكون هنالك ثلاث دوال ذاتية هي:

$$|1,1>,|1,0>,|1,-1>$$

(ب) إذا كان $s=0$ فإن $m_s=0$ و تكون هنالك دالة ذاتية واحدة هي:

$$|0,0>$$

نلاحـظ أن الدالـة الجديـدة $|1,-1>$ تقابـل الدالـة القديمـة التـي لهـا $s_1 = s_2 = \dfrac{1}{2}$ و $m_{s1} = m_{s2} = -\dfrac{1}{2}$، أي الدالـة $|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>$ وبالتـالي نجـد أن $|1,-1> = |-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>$ وكذلك الدالة الذاتية الجديدة $|1,1>$ تقابل الدالة الذاتية القديمة $|+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}>$ وبالتـالي نجـد أن $|1,1> = |+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}>$. ولمعرفـة الدالـة الذاتيـة $|1,0>$ نقـوم بالتـأثير علـى الحالة $|1,1>$ بالمؤثر الخافض S_- علي النحو التالي

$$S_- |1,1> = (S_{1-} + S_{2-}) |+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>$$

$$S_- |1,1> = S_{1-} |+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}> + S_{2-} |+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}> \qquad (A)$$

ونعلم من المعادلتين (3.61) و (3.62) أن

$$S_{\pm} |s, m_s> = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}\, |s, m_s \pm 1>$$

إذاً يكون

$$S_- |1,1> = \hbar\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)}\, |1,0> = \hbar\sqrt{2}\, |1,0> \qquad (B)$$

ومع العلم بأن $(s_1 = s_2 = \frac{1}{2})$

$$S_{1\pm} |m_{s1}, m_{s2}> = \hbar\sqrt{s_1(s_1+1) - m_{s1}(m_{s1} \pm 1)}\, |m_{s1} \pm 1, m_{s2}>$$

و

$$S_{2\pm} |m_{s1}, m_{s2}> = \hbar\sqrt{s_2(s_2+1) - m_{s2}(m_{s2} \pm 1)}\, |m_{s1}, m_{s2} \pm 1>$$

نجد أن

$$S_{1-} |+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}> = \hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) - \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}-1)}\, |-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>$$
$$S_{1-} |+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}> = \hbar\ |-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>$$

و

$$S_{2-}\,|+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>=\hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}-1)}\,|+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

$$S_{2-}\,|+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>=\hbar\;|+\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

وبالتعويض عن المعادلتين الأخيرتين في المعادلتين (A) و (B) تصبح الدالة الذاتية $|1,0>$ في الصورة التالية

$$|1,0>=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>+|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>\right)$$

ونحصل علي الدوال الذاتية $|s,m_s>=|0,0>$ من فكرة أنها تجميع للدالتين $|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$ اللتين لهما $m_{s1}=\tfrac{1}{2}\,,m_{s2}=-\tfrac{1}{2}$ و $m_{s1}=-\tfrac{1}{2}\,,m_{s2}=\tfrac{1}{2}$ حيث $m_s=m_{s1}+m_{s2}$. ومن ثم نستخدم شرط التعامد مع الدالة الذاتية $|1,0>$.

نكتب أولاً الدالة $|0,0>$ في الصورة العامة التالية

$$|0,0>=a\,|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>+b\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

حيث $a\,,b$ ثابتان. وبما أن هذه الدالة مُعّايرة فإن $|a|^2+|b|^2=1$. ومن شرط التعامد مع الدالة $|1,0>$ نجد أن $a=-b=\frac{1}{\sqrt{2}}$ ومنها نجد أن

$$|0,0>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>-|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>)$$

وتصبح الدوال الأربعة الجديدة هي:

$$|1,-1>=|-\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

$$|1,1>=|+\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>$$

$$|1,0>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>+|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>)$$

$$|0,0>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|-\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}>-|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>)$$

وتُكتب أحياناً الدوال أعلاه علي الصورة التالية

$$
\begin{aligned}
|1,1> &= \uparrow\uparrow \\
|1,0> &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\
|1,-1> &= \downarrow\downarrow \\
|0,0> &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)
\end{aligned}
$$

ونلاحظ أن الدوال الذاتية الثلاثة الأولى تقابل الحالة التي لها $s=1$ وتُعرف بالحالات الثلاثية (triplet-state) و تُعرف الدالة الذاتية التي لها $s=0$ بالحالة المنفردة (singlet-state). ونلاحظ انه إذا أبدلنا الإلكترون الأول مكان الثاني في الدوال أعلاه، نجد أن الحالة الثلاثية لا تتغير (موجبة)، أما الحالة المنفردة فتصبح سالبة. ونقول بان الحالة الثلاثية موجبة القطبية والحالة المنفردة سالبة القطبية. وبعبارة أخرى تُعرف الحالة الثلاثية بأنها متماثلة (symmetric) والفردية بأنها لامتماثلة (antisymmetric). وعموماً نقول بأن الدالة $f(x)$ موجبة القطبية (زوجية) إذا كان $f(-x)=+f(x)$ ، وسالبة القطبية (فردية) إذا كان $f(-x)=-f(x)$.

وبناءا علي مبدأ باولي للاستبعاد تكون دالة الموجة الكاملة (الكلية) للإلكترون لامتماثلة إذا أبدلنا إلكترون مكان إلكترون آخر. وبم أن الدالة الكاملة تتكون من جزءين – الأول فضائي (spatial) وهو ψ_{n,ℓ,m_ℓ} والثاني مغزلي وهو χ_{s,m_s} ، فإذا كان الجزء الأول متماثل فإن الجزء الثاني يكون لامتماثل، وإذا كان الأول لامتماثل يكون الثاني متماثل. وبم أن قطبية الدالة ψ_{n,ℓ,m_ℓ} هي $(-1)^\ell$ ، فإن قطبية الحالة الأرضية الفضائية لذرة الهيدروجين ($\ell=0$) مثلاً تكون موجبة، فيجب أن تكون الدالة الغزلية في الحالة الأرضية سالبة ليتحقق مبدأ باولي. ونجد في

ذرة الهليوم التـي تتكـون مـن إلكتـرونين أن الحالـة الأرضـية الفضـائية متماثلـة وبالتالي يجب أن تكون الدالة الغزلية لامتماثلة وبالتالي تكون دالة مغزلـه منفردة (Singlet). أما الحالة المثارة له يمكن أن تكون ثلاثية أو منفردة. وكذلك نجد أن عنصر الديوتريوم الذي تتكون نواتـه من بروتـون واحد ونيوترون واحد لـه حالة مستقرة واحدة هي الحالة الغزلية الثلاثية (Triplet). ويمكن أيضـاً كتابـة الدوال أعلاه علي الصورة

$$|1,1\rangle = |++\rangle$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$$

$$|1,-1\rangle = |--\rangle$$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

حيث $-\frac{1}{2} \equiv -\,, \frac{1}{2} \equiv +$. وبما أن $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ فإن

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$$

$$= \frac{3}{2}\hbar^2 + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}$$

حيث $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = S_{1z}S_{2z} + \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})$. نجد أن

$$S^2 \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \left(S_1^2 + S_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})\right)|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

$$S_1^2 \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \hbar^2\, \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \tfrac{3}{4}\hbar^2 \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

$$S_2^2 \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \hbar^2\, \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)\,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \tfrac{3}{4}\hbar^2 \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

$$S_{1z} \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \tfrac{1}{2}\hbar \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

$$S_{2z} \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}> = \tfrac{1}{2}\hbar \,|\, \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

$$S_{1+}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=0$$

$$S_{2+}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=0$$

$$S_{1-}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=\hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}-1)}\,|-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=\hbar\,|-\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$$

$$S_{1-}S_{2+}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=S_{1+}0=0$$

$$S_{2-}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=\hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}-1)}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>=\hbar\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

$$S_{1+}S_{2-}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=\hbar S_{1+}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>=0$$

ومنها نجد أن

$$\hat{S}^2|--\rangle = 2\hbar^2|--\rangle$$

$$\hat{S}^2|++\rangle = 2\hbar^2|++\rangle$$

نجد أن عمل المؤثر $P_{S=1}=\frac{3}{4}+\frac{1}{\hbar^2}S_1\cdot S_2$ علي الحالة الثلاثية يُعطي

$$P_{S=1}|1,+1>=(\tfrac{3}{4}+\tfrac{1}{\hbar^2}S_1\cdot S_2)|1,+1>=+1|1,+1>$$
$$P_{S=1}|1,0>=(\tfrac{3}{4}+\tfrac{1}{\hbar^2}S_1\cdot S_2)|1,0>=+1|1,+1>$$
$$P_{S=1}|1,-1>=(\tfrac{3}{4}+\tfrac{1}{\hbar^2}S_1\cdot S_2)|1,-1>=+1|1,+1>$$

وكذلك عمل المؤثر $P_{S=0}=\frac{1}{4}-\frac{1}{\hbar^2}S_1\cdot S_2$ علي الحالة المنفردة ينتج

$$P_{S=0}|0,0>=(\tfrac{1}{4}-\tfrac{1}{\hbar^2}S_1\cdot S_2)|0,0>=0|0,0>=0$$

ونلاحظ انهما مؤثرا إسقاط.

مثال (7):

إلكترونان غزل كل منهما $s=\frac{1}{2}$ وكان مؤثر هاملتون لهما يُعطي بـ

$$H=\alpha S_{1z}+\beta S_{2z}+\gamma \mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2$$

حيث α, β, γ ثوابت. أوجد القيم الذاتيـة لــ H مستخدماً أي تمثيل تريده. تأكد أنه يجب أن تكون الدالـة الذاتيـة لأي تمثيل دالـة ذاتيـة لمؤثر هاملتون، أي تأكد أولاً أن H يتبـادل مـع كـل المـؤثرات التـي تشـترك فـي الدالـة الذاتيـة. (إسـتخدم الوحدات بحيث أن $\hbar = 1$)

الحل

في تمثيل $|s,m_s>$ وجدنا أن الدوال الذاتية هي

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|+,-\rangle - |-,+\rangle\,],$$
$$|1,+1\rangle = |+,+\rangle,$$
$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,|+,-\rangle + |-,+\rangle\,],$$
$$|1,-1\rangle = |-,-\rangle,$$

ووجدنا كذلك أن هذه الـدوال دوال ذاتيـة للمـؤثرين S^2, S_z. ولكـن نعلـم أن الـدوال أعلاه لا تكون دوال ذاتية للمؤثر $S_1 \cdot S_2$. وفي هذه الحالة نكتب هذا المؤثر بدلالـة مــــؤثرات تتبــــادل مــــع S^2, S_z. نجـــد أن $S = S_1 + S_2$ ومنهـــا فـــإن $S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2$ وبالتالي نحصل علي

$$S_1 \cdot S_2 = \tfrac{1}{2}\left(S^2 - S_1^2 - S_2^2\right)$$

ونجـد هنـا أن $S_1 \cdot S_2$ يتبـادل مـع كـل مـن S_1^2 و S_2^2 ومـع $S_z = S_{1z} + S_{2z}$ أيضـاً، وبالتالي يصبح مؤثر هاملتون في الصورة التالية

$$H = \alpha S_{1z} + \beta S_{2z} + \tfrac{\gamma}{2}(S^2 - S_1^2 - S_2^2)$$

ونجـد أن $[H,S_1^2] = [H,S_2^2] = [H,S_{1z}] = [H,S_{2z}] = 0$ وبالتــالي تكـون الـدوال الذاتيـة مشـتركة لهـذه المـؤثرات. يمكـن كتابـة H فـي القواعـد $|s,m_s>$ علـي الصورة العامة

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & H_{14} \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & H_{24} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & H_{34} \\ H_{41} & H_{42} & H_{43} & H_{44} \end{pmatrix}$$

حيث

$H_{ij} =< i \mid H \mid j >$ و $\mid 1 >=\mid 0,0 >$ ، $\mid 2 >=\mid 1,1 >$ ، $\mid 3 >=\mid 1,0 >$ ، $\mid 4 >=\mid 1,-1 >$.

وبما أن

$$S^2 \mid 1,0 >= 1(1+1) \mid 1,0 >= 2 \mid 1,0 >$$

وعموماً نجد أن

$$S^2 \mid 1,0 >= 2 \mid 1,0 >, S^2 \mid 1,1 >= 2 \mid 1,1 >, S^2 \mid 1,-1 >= 2 \mid 1,-1 > , S^2 \mid 0,0 >= 0$$

وعلي سبيل المثال نجد أن

$$S_1^2 \mid 1,0 >= S_1^2 \left(\sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} > + \sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} > \right)$$
$$S_1^2 \mid 1,0 >= \sqrt{\tfrac{1}{2}} S_1^2 \mid \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} > + \sqrt{\tfrac{1}{2}}\, S_1^2 \mid -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} >$$
$$S_1^2 \mid 1,0 >= \sqrt{\tfrac{1}{2}}\, \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) \mid \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} > + \sqrt{\tfrac{1}{2}}\, \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) \mid -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} >$$
$$S_1^2 \mid 1,0 >= \tfrac{3}{4} \left(\sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2} > + \sqrt{\tfrac{1}{2}} \mid -\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2} > \right) = \tfrac{3}{4} \mid 1,0 >$$

وعموماً نجد أن

$$S_1^2 \mid 1,0 >= \tfrac{3}{4} \mid 1,0 > \ , \ S_1^2 \mid 1,1 >= \tfrac{3}{4} \mid 1,1 >$$
$$S_1^2 \mid 1,-1 >= \tfrac{3}{4} \mid 1,-1 > \ , \ S_1^2 \mid 0,0 >= \tfrac{3}{4} \mid 0,0 >$$

وكذلك نجد أن

$$S_2^2 \mid 1,0 >= \tfrac{3}{4} \mid 1,0 >, S_2^2 \mid 1,1 >= \tfrac{3}{4} \mid 1,1 >, S_2^2 \mid 1,-1 >= \tfrac{3}{4} \mid 1,-1 >$$

و

$$S_{1z}|1,+1\rangle = +\frac{1}{2}|1,+1\rangle\ ,$$
$$S_{2z}|1,+1\rangle = +\frac{1}{2}|1,+1\rangle\ ,$$
$$S_{1z}|1,-1\rangle = -\frac{1}{2}|1,-1\rangle\ ,$$
$$S_{2z}|1,-1\rangle = -\frac{1}{2}|1,-1\rangle\ ,$$

$$S_{1z}|1,0\rangle = +\frac{1}{2}|0,0\rangle\ ,$$
$$S_{1z}|0,0\rangle = +\frac{1}{2}|1,0\rangle\ ,$$
$$S_{2z}|1,0\rangle = -\frac{1}{2}|0,0\rangle\ ,$$
$$S_{2z}|0,0\rangle = -\frac{1}{2}|1,0\rangle\ .$$

والآن يأخذ مؤثر هاملتون في هذه القواعد الشكل التالي

$$H = \begin{pmatrix} -\frac{3}{4}\gamma & 0 & \frac{1}{2}(\alpha-\beta) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(\alpha+\beta)+\frac{1}{4}\gamma & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(\alpha-\beta) & 0 & \frac{1}{4}\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}(\alpha+\beta)+\frac{1}{4}\gamma \end{pmatrix}$$

وتكون القيم الذاتية له هي:

$$E_1 = \frac{1}{4}\gamma + \frac{1}{2}(\alpha+\beta)\ ,$$
$$E_2 = \frac{1}{4}\gamma - \frac{1}{2}(\alpha+\beta)\ ,$$

و

$$E_3 = -\frac{1}{4}\gamma + \frac{1}{2}\sqrt{\gamma^2+(\alpha-\beta)^2}\ ,$$
$$E_4 = -\frac{1}{4}\gamma - \frac{1}{2}\sqrt{\gamma^2+(\alpha-\beta)^2}\ .$$

ونحصل علي الدوال الذاتية لـ H بالطريقة المعتادة للمصفوفات.

مثال (8):

أوجد الدوال الذاتية لمنظومة مكونة من جسيمين لهما $s_1 = s_2 = 1$ بدلالـة القواعد $|m_{s1}, m_{s2}>$ و بدلالة القواعد $|s, m_s>$.

الحل

إذا كـان $s_1 = 1\,,\, s_2 = 1$ فـإن فضـاء حاصـل الضـرب ($|m_{s1}, m_{s2}>$) يكـون بُعده $N = (2s_1 + 1)(2s_2 + 1) = 9$. ويتكــون هــذا الفضـــاء مــن فضــائيين داخليــين (subspaces) بعديهـما علــي النحـو التـالي $N_1 = 3$ $N_2 = 1$., تُعـرف N_1 بالحالة الثلاثية و N_2 بالحالـة المنفردة. ونـود هنا أن نكّون الدوال الذاتيـة لكميـة الحركة الزاوية الغزلية الكلية (S) ومركبتها في إتجاه المحور z (S_z). بم أن الفضاء هنا له بُعد $(2s_1 + 1)(2s_1 + 1) = (2 \times 1 + 1)(2 \times 1 + 1) = 9$ فإن هنالك 9 دوال ذاتية في القواعد الجديدة والقديمة، وتُمثل الدوال الذاتية القديمة بـ

$$|s_1, s_2, m_{s1}, m_{s2} > \equiv |m_{s1}, m_{s2}>$$

(أ) إذا كان $s_1 = 1$ نجد أن $m_{s1} = 1, 0, -1$.

(ب) إذا كان $s_2 = 1$ نجد أن $m_{s2} = 1, 0, -1$.

وبالتالي تكون الدوال الذاتية الممكنة $|m_{s1}, m_{s2}>$ هي:

$$|1,1>, |1,0>, |1,-1>, |0,0>, |0,1>, |0,-1>, |-1,1>, |-1,0>, |-1,-1>$$

ونرمز للدوال الذاتية الجديدة بالرمز $|s\, m_s>'$ (نضع عليها علامة ` لنميزها عن الدوال الذاتية القديمة). وتأخذ s القيم التالية:

$$s = s_1 + s_2\,,\, s_1 + s_2 - 1\,, \cdots, |s_1 - s_2|$$

ومنها نجد أن $s = 2\,,1\,,0$. وتكون قيم m_s هي:

$$m_s = s, s-1, \cdots, -s$$

(أ) فإذا كان $s=2$ فإن $m_s=2,1,0,-1,-2$.

(ب) وإذا كانت $s=1$ فإن $m_s=1,0,-1$.

(ج) وإذا كانت $s=0$ فإن $m_s=0$.

و الآن تكون الدوال الذاتية الجديدة $|s\,m_s>'$ هي:

$$s=2:|2,2>',\quad |2,1>',|\quad 2,0>',\quad |2,-1>',\quad |2,-2>'$$
$$s=1:|1,1>',|1,0>',|1,-1>'$$
$$s=0:|0,0>'$$

وهي تسعة دوال ذاتية كما أشرنا إليها سابقاً.

نلاحظ أن الدالة $|2,2>'=|1,1>$ وذلك لأن كل منهما يقابل الحالة $m_{s1}=m_{s2}=1$ حيث $m_s=m_{s1}+m_{s2}=2$. وبنفس الطريقة نجد أن $|2,-2>'=|-1,-1>$ وذلك لأن $m_{s1}=m_{s2}=-1$ حيث $m_s=m_{s1}+m_{s2}=-2$. والآن يمكننا الحصول علي كل الدوال الذاتية الأخرى وذلك بالتأثير المتواصل بالمؤثر الخافض $S_-=S_{-1}+S_{-2}$ علي الحالة $|2,2>'$ أو بالمؤثر الرافع $S_+=S_{+1}+S_{+2}$ على الحالة $|2,-2>'$.

ونجد أن $S_{\pm1,\pm2}$ تؤثر علي الدوال القديمة $|m_{s1},m_{s2}>$ بينما تؤثر $S_{\pm}$ علي الدوال الذاتية الجديدة $|s,m_s>'$ وذلك على النحو التالي:

$$S_-|2,2>'=(S_{-1}+S_{-2})|1,1>=S_{-1}|1,1>+S_{-2}|1,1>$$

حيث

$$S_-|2,2>'=\hbar\sqrt{2(2+1)-2(2-1)}\;|2,1>'$$
$$S_-|2,2>'=2\hbar|2,1>'$$

و

$$S_{-1}\,|1{,}1>=\hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}\,|0{,}1>$$

$$S_{-1}\,|1{,}1>=\hbar\sqrt{2}\,|0{,}1>$$

$$S_{-2}\,|1{,}1>=\hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}\,|1{,}0>$$

$$S_{-2}\,|1{,}1>=\hbar\sqrt{2}\,|1{,}0>$$

وبالتعويض نجد أن

$$|2{,}1>'=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0{,}1>+|1{,}0>)$$

وبتأثير المؤثر الخافض S_- علي الدالة أعلاه نحصل علي الدالة $|2{,}0>'$ وذلك علي النحو التالي

$$S_-\,|2{,}1>'=\hbar\sqrt{2(2+1)-1(1-1)}\,|2{,}0>'$$

$$S_-\,|2{,}1>'=\hbar\sqrt{6}\,|2{,}0>'$$

ولكن

$$S_-\,|2{,}1>'=(S_{-1}+S_{-2})\,|2{,}1>'=(S_{-1}+S_{-2})\frac{1}{\sqrt{2}}(|0{,}1>+|1{,}0>)$$

ونجد أن (حيث نعلم أن $s_1=s_2=1$ لكل هذه الدوال)

$$S_{-1}\frac{1}{\sqrt{2}}(|1{,}0>+|0{,}1>)=\frac{1}{\sqrt{2}}(S_{-1}\,|1{,}0>+S_{-1}\,|0{,}1>)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-1}\,|1{,}0>=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\sqrt{1(1+1)-0(0-1)}\,|0{,}0>$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-1}\,|1{,}0>=\hbar\,|0{,}0>$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-1}\,|\,0,1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}\,|-1,1>$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-1}\,|\,0,1>=\hbar\,|-1,1>$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-2}\,|\,1,0>=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\sqrt{1(1+1)-0(0-1)}\,|\,1,-1>$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-2}\,|\,1,0>=\hbar\,|\,1,-1>$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-2}\,|\,0,1>=\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}\,|\,0,0>$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}S_{-2}\,|\,0,1>=\hbar\,|\,0,0>$$

بالتعويض نجد أن

$$|\,2,0>'=\frac{1}{\sqrt{6}}(|-1,1>+2\,|\,0,0>+|\,1,-1>)$$

وبنفس الكيفية وبتأثير المؤثر الخافض S_- علي الدالة $|\,2,0>'$ نحصل علي الدالة

$$|\,2,-1>'=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\,0,-1>+|-1,0>)$$

ومما سبق نجد أن

$$|\,2,-2>'=|-1,-1>$$

ونلاحظ أن كل الدوال الذاتية التسعة القديمة قد إستخدمت للحصول علي الخمسة الدوال الذاتية الأولى. ولقد تبّين أن كل الدوال الذاتية الجديدة التي لها

نفس قيمه m_s هي عبارة عن تجميع خطى لنفس مجموعة الدوال الذاتية القديمة التي تحقق كل منها الشرط $m_s = m_{s1} + m_{s2}$.

والآن نختار الدالة $|1,1\rangle'$ التي لها $s=1, m_s=1$ حيث نجد أنها تجميع لكل من الدالتين القديمتين التاليتين: $|1,0>$ و $|0,1>$. ونكتب أولاً الدالة الذاتية $|1,1\rangle'$ في الصورة العامة التالية

$$|1,1>' = a\,|1,0> + b\,|0,1>)$$

ولكن نعلم أن الدالة $|1,1\rangle'$ متعامدة مع الدالة $|2,1>'$، فمن شرط التعامد ومُعّايرة الدالة نجد أن $a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}$، ومنها تصبح الدالة $|1,1\rangle'$ في الصورة التالية

$$|1,1>' = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0> + |0,1>)$$

وللحصول على $|1,0>'$ نجد أنها تتكون من الدالتين القديمتين: $|1,-1>, |-1,1>$ وذلك لأن $s=1, m_s = m_{s1}+m_{s2}=0$ تعني أن $m_{s1}=1, m_{s2}=-1$ و $m_{s1}=-1, m_{s2}=1$. ونكتب أولاً الدالة الذاتية $|1,0>'$ في الصورة العامة التالية

$$|1,0>' = a\,|1,-1> + b\,|-1,1>)$$

وبإستخدام شرط التعامد مع الدالة $|1,1>'$ ومُعّايرة الدالة $|1,0>'$ نحصل علي الثابتين a,b حيث نجد أن $b=-\frac{1}{\sqrt{2}}$, $a=\frac{1}{\sqrt{2}}$ وتصبح دالة الحالة في الصورة

$$|1,0>' = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,-1> - |-1,1>)$$

وبإستخدام المؤثر الخافض S_- علي الدالة $|1,0>'$ ، أي $S_-|1,0>'$ نحصل على الدالة $|1,-1>'$ والتي تأخذ الشكل التالي

$$|1,-1>'=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0,-1>-|-1,0>)$$

ولكـي نحصـل علـي الدالـة الأخيـرة $|0,0>'$ ، أي $s=0\,,m_s=m_{s1}+m_{s2}=0$ نلاحـــظ أن هـــذه الحالـــة تعنـــي أن $m_{s1}=1\,,m_{s2}=-1$ ، $m_{s1}=-1\,,m_{s2}=1$ ، $m_{s1}=0\,,m_{s2}=0$ ، وبالتالي تتكون هذه الدالـة من الـدوال الذاتيـة القديمـة التاليـة: $|1,-1>$ ، $|-1,1>$ ، $|0,0>$، إذاً نجد أن الصورة العامة لهذه الدالة هي:

$$|0,0>'=a|-1,1>+b|1,-1>+c|0,0>$$

حيـث a,b,c ثوابـت. ويجـب كـذلك أن تكـون هـذه الدالـة متعامـدة علـى كـل مـن $|1,0>',|2,0>'$. وبأخـذ شـرط التعامـد مـع $|2,0\rangle'$ و $|1,0\rangle'$ وبمُعّـايرة الدالـة ، أي $|a|^2+|b|^2+|c|^2=1$ نحصـل علـى قـيم الثوابـت a,b,c والتـي تُعطـي بـالقيم التالية $a=b=\frac{1}{\sqrt{3}}=-c$. وبذلك تصبح الدالة $|0,0>'$ في الصورة التالية

$$|0,0>'=\frac{1}{\sqrt{3}}(|1,-1>+|-1,1>-|0,0>)$$

وبتطبيق هذه الطريقة نحصل علي كل الدوال الذاتية الجديدة المكونـة من الدوال الذاتية القديمة.

تمرين:

(1) إلكترونـان لهمـا مـؤثرا مغـزل S_1 و S_2. أوجد متوسط الضـرب $S_1 \cdot S_2$ فـي الحالة الغزلية المنفردة والثلاثية التي حصلنا عليها في المثال **(1)**.

(2) يُوصـف مـؤثر المغـزل لمنظومـة تتكـون مـن إلكتـرونين بالحـالـة المنفـردة والثلاثيـة الموضـحة فـي المثـال **(1)** أعـلاه. إذا أضـفنا إلكتـرون ثالـث لهـذه المنظومـة، أثبـت أن المغـزل الكلـي للمنظومـة هـو $S = \frac{3}{2}$ (الحالـة الرباعيـة) و $S = \frac{1}{2}$ (الحالة الثنائية). أوجد دوال المغزل لكل حالة.

(افترض أن المنظومة السابقة هي منظومة لها $S = 0$ أو $S = 1$).

(3) بيّن أن المؤثر $S_1 \cdot S_2$ يمكن كتابته في الصورة

$$S_1 \cdot S_2 = S_{1z}S_{2z} + \frac{1}{2}(S_{+1}S_{-2} + S_{-1}S_{+2})$$

ثم أوجد الشكل المصفوفى للمؤثر $S_1 \cdot S_2$ في القواعد $|m_{s1}, m_{s2}>$ و كذلك في القواعد $|s, m_s>$ الموضحة في المثال **(1)**.

(4) بيّن أن المؤثر S^2 لإلكترونين يمكن كتابته على الصورة التالية

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 + 2S_{1z}S_{2z} + (S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})$$

(5) أثبت أن الدوال الذاتية للمؤثرات $S_1{}^2, S_2{}^2, S_{1z}, S_{2z}$ ليست كلها دوال ذاتية للمؤثر $S^2 = (S_1 + S_2)^2$.

3.5.2 الدوال الذاتية لكمية الحركة الزاوية الكلية

خُذ الآن جسيماً له كمية حركة زاوية غزلية مؤثرها S ومدارية مؤثرها L. نجد أن كمية الحركة الزاوية الكلية تُعطي بالمؤثر $J = L + S$. ونجد كذلك أن كل مركبات المؤثر S تتبادل مع مركبات المؤثر L، أي $[L,S] = 0$ وذلك لأن كل منهما يعمل علي فضاء مختلف، وبالتالي نجد أن علاقات أقواس التبادل لمركبات J هي نفسها كما لـ L و S، وذلك كما أوضحنا هذا سابقاً.

ونُرمِز بـ $m_\ell \, , m_s \, , m_j$ لأعداد الكم المقابلة للمؤثرات L_z, S_z, J_z علي الترتيب. وكما سبق أن أوضحنا، أن الدوال الذاتية للمؤثرين L^2, L_z هي $Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\varphi) = |\, \ell, m_\ell >$، حيث $\ell = 0 \, , 1 \, , 2 \, , \cdots$ عدد صحيح و $m_\ell = \ell \, , \ell - 1 , \cdots , -\ell$، والدوال الذاتية للمؤثرين S^2, S_z هي $\chi_{s,m_s} = |\, s, m_s >$، حيث $m_s = s \, , s-1 , \cdots , -s$. والآن تكون الدوال الذاتية للمؤثرات L^2, S^2, L_z, S_z هي حاصل الضرب لهاتين الدالتين، أي

$$|\, \ell, s, m_\ell, m_s > = |\, \ell, m_\ell > |\, s, m_s > \tag{3.78}$$

ولقيمة معينة لـ ℓ و s يمكن كتابة الدالة أعلاه في الصورة

$$|\, \ell, s, m_\ell, m_s > = |\, m_\ell, m_s > \tag{3.79}$$

وتكون القيم الممكنة لعدد الكم المداري الكلي j علي النحو التالي

$$j = \ell + s \, , \ell + s - 1 , \cdots , |\, \ell - s \,| \tag{3.80}$$

ومنها نجد أن القيم الممكنة لعدد الكم المغناطيسي الكلي m_j هي

$$m_j = j \, , j - 1 , \cdots , -j \tag{3.81}$$

مثال (8):

أوجد الدوال الذاتية لإلكترون في الحالة الطيفية p بدلالة $|m_\ell ,m_s>$ تارة وبدلالة $|j,m_j>$ تارة أخرى.

الحل

تعني الحالة الطيفية p ، أن عدد الكم المداري $\ell = 1$ ومنهـا نجد أن $m_\ell = 1,0,-1$.

وللإلكتـرون نعلـم أن $s = \frac{1}{2}$ ومنهـا نجـد أن $m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$. ويُعطـي عـدد الـدوال الذاتية (القواعد) $|m_\ell ,m_s>$ بـ $(2\ell+1)(2s+1)=6$.

نجد أن الدوال الذاتية $|\ell ,m_\ell>$ لكمية الحركة الزاوية المدارية هي:

$$|1,1>, |1,0>, |1,-1>$$

والدوال الذاتية $|s,m_s>$ لكمية الحركة الزاوية الغزلية هي:

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>, |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

ومنهما تكون الدوال الذاتية المشتركة (حاصل ضربهما) في الصورة

$$|\ell ,s,m_\ell ,m_s> = |m_\ell ,m_s>$$

وهي:

$$|0,-\tfrac{1}{2}>, |0,\tfrac{1}{2}> \text{ ، } |-1,-\tfrac{1}{2}>, |-1,\tfrac{1}{2}> \text{ ، } |1,-\tfrac{1}{2}>, |1,\tfrac{1}{2}>$$

وهي ستة دوال ذاتية مستقلة كما ذكرنا آنفاً. ونجد أن هذه الـدوال هـي دوال ذاتيـة لكل المؤثرات التالية

$$L^2, S^2, L_z, S_z$$

حيث نجد أن

$$L^2 \,|\, m_\ell, m_s >= \hbar^2 \ell(\ell+1) \,|\, m_\ell, m_s >$$

$$S^2 \,|\, m_\ell, m_s >= \hbar^2 s(s+1) \,|\, m_\ell, m_s >$$

$$L_z \,|\, m_\ell, m_s >= m_\ell \hbar \,|, m_\ell, m_s >$$

$$S_z \,|\, m_\ell, m_s >= m_s \hbar \,|\, m_\ell, m_s >$$

ولحساب قيمة J^2 في هذه القواعد نجد أن

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}_z\hat{S}_z + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+$$

ومنه يكون

$$J^2 \,|\, m_\ell, m_s >= (L^2 + S^2 + 2L_zS_z + L_+S_- + L_-S_+) \,|\, m_\ell, m_s >$$

حيث

$$S_+ \,|\, m_\ell, m_s >= \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)} \,|\, m_\ell, m_s + 1 >$$

$$S_- \,|\, m_\ell, m_s >= \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)} \,|\, m_\ell, m_s - 1 >$$

$$L_+ \,|\, m_\ell, m_s >= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell+1)} \,|\, m_\ell + 1, m_s >$$

$$L_- \,|\, m_\ell, m_s >= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell-1)} \,|\, m_\ell - 1, m_s >$$

ولحساب $L \cdot S$ في هذه القواعد نجد أن

$$L \cdot S \,|\, m_\ell, m_s >= (L_zS_z + \tfrac{1}{2}(L_+S_- + L_-S_+)) \,|\, m_\ell, m_s >$$

ولإيجاد الدوال الذاتية الجديدة $|\, j,, m_j >$، نوجد قيم j و m_j. نعلم مما سبق أن $j = \ell + \frac{1}{2}$ و $j = \ell - \frac{1}{2}$، أي $j = 1 + \frac{1}{2}, \cdots, 1 - \frac{1}{2}$، أي تكـــون $j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$، وبالتــــالي تصـــبح الـــدوال الذاتيـــة الجديـــدة $|\, j, m_j >$ وعـــددها $(2\ell+1)(2s+1) = 3 \times 2 = 6$ وهي:

$$j=\tfrac{1}{2}:|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>,\ |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$$

$$j=\tfrac{3}{2}:|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>,\ |\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>,|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}>,\ |\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}>$$

وهي دوال ذاتية للمؤثرين J^2, J_z و نجد أن

$$J^2\,|\,j,m_j>=\hbar^2 j(j+1)\,|\,j,m_j>$$

$$J_z\,|\,j,m_j>=\hbar m_j\,|\,j,m_j>$$

ونجد أن هذه الدوال $(|\,j,m_j>)$ تتكون أساساً من تجميع من الدوال الذاتية القديمة. فمثلاً نجد أن الدالة الذاتية الجديدة $|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>$ تعني أن $m_j=\tfrac{3}{2}$ حيث $m_j=m_\ell+m_s$ والتي تتحقق فقط إذا كان $m_\ell=1\,, m_s=\tfrac{1}{2}$ وهي حالة واحدة من بين الحالات القديمة المذكورة سابقاً، أي $|1,\tfrac{1}{2}>$ وعليه نجد أن $|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>=|1,\tfrac{1}{2}>$. وبالمثل نجد أن الدالة الذاتية الجديدة $|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}>$ تعني أن $m_j=-\tfrac{3}{2}$ حيث $m_j=m_\ell+m_s$ والتي تتحقق فقط إذا كان $m_\ell=-1\,, m_s=-\tfrac{1}{2}$ وهي تقابل حالة واحدة من بين الحالات القديمة المذكورة سابقاً، أي $|-1,-\tfrac{1}{2}>$ $|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}>=$. ونحصل علي الدالتين الذاتيتين $|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>,|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}>$ بتأثير المؤثر الخافض J_- علي الدالة $|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>$، أو الرافع J_+ علي الدالة $|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}>$. ونعلم مما سبق أن

$$J_\pm\,|\,j,m_j>=\hbar\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j\pm1)}\,|\,j,m_j\pm1>$$

وبالتالي نجد أن

$$J_-\,|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>=\hbar\sqrt{\tfrac{3}{2}(\tfrac{3}{2}+1)-\tfrac{3}{2}(\tfrac{3}{2}-1)}\,|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>$$
$$J_-\,|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>=\hbar\sqrt{3}\ \,|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>$$

ولكن

$$J_- = L_- + S_-$$

حيث يؤثر L_-, S_- علي الدوال الذاتية القديمة وذلك علي النحو التالي

$$L_\pm | m_\ell, m_s >= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell \pm 1)}\, | m_\ell \pm 1, m_s >$$

$$S_\pm | m_\ell, m_s >= \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}\, | m_\ell, m_s \pm 1 >$$

والآن نجد أن

$$J_- | \tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2} >= \hbar\sqrt{\tfrac{3}{2}(\tfrac{3}{2}+1) - \tfrac{3}{2}(\tfrac{3}{2}-1)}\, | 1, \tfrac{1}{2} >$$
$$J_- | \tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2} >= \hbar\sqrt{3}\, | 1, \tfrac{1}{2} >$$

مع العلم بأن

$$J_- | \tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2} >= (L_- + S_-) | 1, \tfrac{1}{2} >$$

$$J_- | \tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2} >= L_- | 1, \tfrac{1}{2} > + S_- | 1, \tfrac{1}{2} >$$

نجد أن

$$L_- | 1, \tfrac{1}{2} >= \hbar\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)}\, | 0, \tfrac{1}{2} >$$
$$L_- | 1, \tfrac{1}{2} >= \hbar\sqrt{2}\, | 0, \tfrac{1}{2} >$$

وكذلك

$$S_- | 1, \tfrac{1}{2} >= \hbar\sqrt{\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1) - \tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}-1)}\, | 1, -\tfrac{1}{2} >$$
$$S_- | 1, \tfrac{1}{2} >= \hbar\, | 1, -\tfrac{1}{2} >$$

وبالتعويض في المعادلة أعلاه نجد أن الدالة $| \tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2} >$ تُعطي بـ

$$| \tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2} >= \tfrac{1}{\sqrt{3}} | 1, -\tfrac{1}{2} > + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\, | 0, \tfrac{1}{2} >$$

وبتأثير المؤثر الخافض J_- علي الحالة $| \tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2} >$ نحصل علي الدالة $| \tfrac{3}{2}, -\tfrac{1}{2} >$،
حيث نجد أن

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}>=\tfrac{1}{\sqrt{2}}|-1,\tfrac{1}{2}>+\tfrac{1}{\sqrt{2}}|0,-\tfrac{1}{2}>$$

وللدالتين $|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$ و $|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$ نجد أن الدالة $|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$ تعني أن $j=\tfrac{1}{2},m_j=\tfrac{1}{2}$ وبما أن $m_j=m_\ell+m_s=\tfrac{1}{2}$ و $j=\tfrac{1}{2}$ فإن هنالك دالة واحد تحقق هذه الحالة والتي لها $\ell=0$ و $s=\tfrac{1}{2}$ ومنها تكون $m_\ell=0$ و $m_s=\tfrac{1}{2}$، وتكون هذه هي الدالة الذاتية القديمة $|0,\tfrac{1}{2}>$ وبالتالي نجد أن $|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>=|0,\tfrac{1}{2}>$ وبالمثل نجد أن الدالة $|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>=|0,-\tfrac{1}{2}>$. ويمكن أيضاً أن نحصل علي الدالة $|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>$ بتأثير المؤثر الخافض J_- علي الدالة $|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}>$، كما فعلنا ذلك في الجزء أعلاه.

نعلم مما سبق أن

$$J=L+S$$

ومنها يكون

$$L\cdot S=\tfrac{1}{2}(J^2-L^2-S^2)$$

ويمكن إيجاد قيمة المؤثر $L\cdot S$ في هذه القواعد وذلك علي الصورة

$$L\cdot S|j,m_j>=\tfrac{1}{2}(J^2-L^2-S^2)|j,m_j>$$
$$L\cdot S|j,m_j>=\hbar^2\tfrac{1}{2}[j(j+1)-\ell(\ell+1)-s(s+1)]|j,m_j>$$

ونحصل علي الحالات التالية

$$L\cdot S|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>=\tfrac{1}{2}\hbar^2[\tfrac{3}{2}(\tfrac{3}{2}+1)-1(1+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)]|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>$$
$$L\cdot S|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>=\tfrac{1}{2}\hbar^2|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>$$

و

$$L\cdot S|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>=\tfrac{1}{2}\hbar^2[\tfrac{3}{2}(\tfrac{3}{2}+1)-0(0+1)-\tfrac{1}{2}(\tfrac{1}{2}+1)]|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}>$$
$$L\cdot S|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>=\tfrac{3}{2}\hbar^2|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>$$

هنالك قاعدة لإيجاد الدوال الذاتية $|j,m_j>$ وذلك علي النحو التالي

(أ) إذا كان $j=\ell+\tfrac{1}{2}$ فإن

$$| j,m_j >= \sqrt{\tfrac{\ell+m_\ell+1}{2\ell+1}}\, | m_\ell, \tfrac{1}{2} > + \sqrt{\tfrac{\ell-m_\ell}{2\ell+1}}\, | m_\ell+1, -\tfrac{1}{2} >$$

(ب) إذا كان $j=\ell-\frac{1}{2}$ فإن

$$| j,m_j >= \sqrt{\tfrac{\ell-m_\ell}{2\ell+1}}\, | m_\ell, \tfrac{1}{2} > - \sqrt{\tfrac{\ell+m_\ell+1}{2\ell+1}}\, | m_\ell+1, -\tfrac{1}{2} >$$

حيث $m_j = m_\ell + \frac{1}{2}$.

فـإذا أردنــا أن نحصــل علــي الدالــة $|\frac{3}{2},\frac{1}{2}>$ فنجـد أن $j=\frac{3}{2}=1+\frac{1}{2}$ و $m_j=\frac{1}{2}$ وبالتـالي فـإن $m_\ell=0$ وذلك لأن $m_j = m_\ell + \frac{1}{2}$ وعليـه نستخدم الحالـة (أ) وتصـبح هذه الدالة علي الصورة

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>= \sqrt{\tfrac{1+0+1}{2+1}}\, |0,\tfrac{1}{2}> + \sqrt{\tfrac{1-0}{2+1}}\, |1,-\tfrac{1}{2}>$$

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}>= \sqrt{\tfrac{2}{3}}\, |0,\tfrac{1}{2}> + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\, |1,-\tfrac{1}{2}>$$

أمـا للحالـة $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}>$ فنجـد أن $j=\frac{1}{2}=1-\frac{1}{2}$ و $m_j=-\frac{1}{2}$ وبالتـالي فـإن $m_\ell=-1$ وذلـك لأن $m_j = m_\ell + \frac{1}{2}$ وعليـه نسـتخدم الحالـة (ب) وتصـبح هـذه الدالـة علـي الصورة

$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>= \sqrt{\tfrac{1+1}{2+1}}\, |-1,\tfrac{1}{2}> + \sqrt{\tfrac{1-1+1}{2+1}}\, |0,-\tfrac{1}{2}>$$

$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}>= \sqrt{\tfrac{2}{3}}\, |-1,\tfrac{1}{2}> + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\, |0,-\tfrac{1}{2}>$$

وبهذه الطريقة يمكن إيجاد كل الدوال المتبقية مباشرة.

تمرين:

(1) يوجد جسيما غزل الأول $s_1=1$ وغزل الثـاني $s_2=2$ فـي حالـة سكون في الحالة التي فيها غزلهما الكلـي $s=3$ ومركبتـه فـي إتجـاه المحـور z تسـاوي 1 . إذا قسنا مركبة غزل الثـاني فـي إتجـاه المحـور z ، فمـا هـي القيم التـي سنحصـل عليها وما هو إحتمال الحصول علي كل قيمة من هذه القيم. الإجابات هي:

$$P(S_{2z}=2\hbar)=\frac{1}{15},\quad P(S_{2z}=\hbar)=\frac{8}{15},\quad \text{and}\quad P(S_{2z}=0)=\frac{6}{15}.$$

(2) أوجد إحتمال الحصول علي $J^2=\frac{3}{4}\hbar^2$ لإلكترون في الحالة الطيفية p و مركبة كمية حركته الزاوية المدارية في إتجاه المحور z تساوي $m_\ell=0$ وغزله في إتجاه المحور z يساوي $m_s=+\frac{1}{2}$.

(3) بيّن أن المؤثر $L\cdot S$ يمكن كتابته في الصورة $L\cdot S=L_zS_z+\frac{1}{2}(L_+S_-+L_-S_+)$. وكذلك أثبت أنه إذا كان $J=L+S$ فإن $2L\cdot S=J^2-L^2-S^2$، ثم أوجد القيمة الذاتية المؤثر $L\cdot S$ لإلكترون في الحالة الطيفية p بدلالة $|j,m_j>$. وهل تكون الدالة $|m_\ell,m_s>$ دالة ذاتية لهذا المؤثر ؟

(4) إذا كان مؤثر هاملتون لمنظومة مكونة من جسيمين هو

$$H=A+\frac{B}{\hbar^2}S_1\cdot S_2+\frac{C}{\hbar}(S_{z1}+S_{2z})$$

أوجد القيم الذاتية والدوال الذاتية للمنظومة إذا كان

(أ) للجسيمين غزل $s=\frac{1}{2}$ (ب) غزل الجسيم الأول $s=\frac{1}{2}$ و غزل الثاني $s=1$.

(5) يوجد إلكترون في الحالة العامة التالية

$$\Psi=\left(\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,Y_{10}\chi_+ +\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,Y_{11}\chi_-\right)$$

حيث $Y=Y(\theta,\varphi)$ و $\chi_\pm$ دوال الغزل بقيمة $m_s=\pm\frac{\hbar}{2}$. ويمكن كتابة الدالة علاه علي الصورة

$$|\Psi_{\ell,m_\ell,m_s}>=\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1,0,\tfrac{1}{2}>+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1,1,-\tfrac{1}{2}>$$

(أ) أوجد القيم الذاتية لكمية الحركة الزاوية الكلية ومركبتها في إتجاه z وإحتمال الحصول علي كل كمية من هذه الكميات.

(ب) أوجد إحتمال وجود الإلكترون بمركبة غزل في إتجاه z بقيمة $+\frac{\hbar}{2}$ ؟

(6) إلكترونـــان فـــي الحالـــة الطيفيـــة $2p$ فـــإذا كانـــت حـــالات غزلـهمـــا فـــي القواعد $|j_1, j_2, m_{j1}, m_{j2}>$ علي النحو التالي:

(i) $|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}> = |1, \frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2}>$

(ii) $|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}> = \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1, \frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1, \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}>$

(iii) $|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}> = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}> + \sqrt{\frac{1}{3}}\,|1, \frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}>$

(iv) $|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}> = |1, -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}>$.

أوجد إحتمال وجود الإلكترون بقيمة غزل $m_{j1} = \frac{1}{2}$.

(7) إذا كانت دالة الإلكترون في ذرة الهيدروجين تُعطي بـ

(أ) $\psi_{n,\ell,m_\ell,m_s} = |n, \ell, m_\ell, m_s> = |3,2,2,\frac{1}{2}>$، أوجد: القيم الذاتية للمؤثرات H, L^2, L_z, S_z.

(ب) $\psi_{n,\ell,j,m_j} = |n, \ell, j, m_j> = |3,2,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}>$، أوجد: القيم ذاتية للمؤثرات H, L^2, J, J_z.

(ج) أوجد متوسط الكميات التالية: $\langle S_z \rangle$ ، $\langle S_x \rangle$ ، $\langle L \cdot S \rangle$ ، $\langle J^2 \rangle$ ، $\langle J_z \rangle$ في الدالتين أعلاه.

(8) إذا كان $j_1 = \frac{3}{2}$ و $j_2 = 1$ أوجد الدوال (القواعد) الذاتية $|j, m_j>$ بدلالة القواعد $|m_{j1}, m_{j2}>$. أوجد إحتمال الحصول علي الحالة التي لها $J = \frac{1}{2}$ و $m_{j1} = -\frac{3}{2}$.

(9) أثبت أن القواعد $|j, m_j>$ مكتملة، أي $1 = |j, m_j><j, m_j| \sum_{m_j}$.

الفصل الرابـع

طرق التقريب والاضطراب المستقل عن الزمن

قد يندهش القارئ بان يعلم بأننا قد عالجنا من قبل معظم المنظومات الطبيعية التي لها حل كامل exact ، أما إذا أردنا أن نطبق ميكانيكا الكم إلي منظومات حقيقية يلزمنا أن نقدم طريقه للحصول على الحل التقريبي للمشكلة. واكثر الطرق شيوعاً المستخدمة للمنظومات المقيدة (bound) هي نظريه الاضطراب (Perturbation theory) للحالات الساكنة التي تشتمل علي طريقتين هما

(أ) الطريقة التقريبية الغير معتمدة علي الزمن والتي تتضمن الحالات المنحلة وغير المنحلة.

(ب) الطريقة التقريبية التغيرية التي تعتمد علي إيجاد حد ادني لطاقة الحالة الأرضية للمنظومة تحت الدراسة.

4.1 نظريه الاضطراب لحالات ساكنه (Stationary States)

اسهل واكثر الطرق مباشرة لحل أي منظومة حقيقية هو اعتبارها (معاملتها) كتعديل (modification) لأحد النماذج المعروف حلها مسبقا. وبالتحديد نود أن نعبر عن مؤثر هاملتون (Hamiltonian) للمنظومة الحقيقية H كمجموع مؤثر هاملتون H_0 المعروف حلها مسابقا، وجزء إضافي H' يحوى التفاعلات الجديدة للمنظومة. وإذا كان H' صغيرا مقارنة مع H_0 فإن مقدار التعديل (التصحيح correction) للدوال الذاتية والقيم الذاتية الناتجة من H' يكون صغيراً أيضاً. في مثل هذه الحالات يمكن استخدام طريقة نظرية الاضطراب. يعمل الاضطراب علي إضافة (نقصان) الطاقة الأولية للنظام و تغير في دالة الموجة الأولية.

أولا نكتب مؤثر هاملتون الكلي للمنظومة الحقيقية في صورة

$$H = H_0 + \lambda H' \qquad (4.1)$$

H_0: الجزء الذي نعرف حله كاملاً و H' يعتبر اضطرابا (perturbation) والوسيط (parameter) λ ، $0 < \lambda < 1$ ، حيث $\lambda = 0$ يُمثل المنظومة المعروف

حلها سابقا و $\lambda = 1$ يمثل المنظومة الحقيقية المراد حلها. وتحقق الدالة الأصلية $\left|\psi_i^{(0)}\right\rangle$ معادلة شرودنجر التالية

$$H_0 |\psi_i^{(0)}> = E_i^{(0)} |\psi_i^{(0)}> \tag{4.2}$$

حيث الدالة $|\psi_i^{(0)}>$ تمثل قواعد متعامدة ومعايرة (Orthonormal) بحيث أن

$$<\psi_i^{(0)}|\psi_j^{(0)}> = \delta_{i,j} \tag{4.3}$$

والمعادلة التي نريد حلها هي

$$H|\psi_n> = E_n|\psi_n>$$

أو

$$(H_0 + \lambda H')|\psi_n> = E_n|\psi_n> \tag{4.4}$$

حيث $\left|\psi_n\right\rangle$ هي دالة المنظومة قبل الاضطراب و E_n طاقتها.

سنقوم بكتابة $\left|\psi_n\right\rangle$ و E_n في صوره متسلسلة قوي بدلالة λ في الصورة

$$\left|\psi\right\rangle_n = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|\psi_n^{(2)}\right\rangle + \lambda^3\left|\psi_n^{(3)}\right\rangle + \lambda^4\left|\psi_n^{(4)}\right\rangle + \dots \tag{4.5}$$

و

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \lambda^3 E_n^{(3)} + \lambda^4 E_n^{(4)} + \dots \tag{4.6}$$

ومهمتنا هنا هو إيجاد التصحيحات للدوال الذاتية والطاقات الذاتية لأي رتبة مطلوبة (معامل λ^1 يمثل الرتبة الأولى ومعامل λ^2 يمثل الرتبة الثانية ... و هكذا.)

بالتعويض عن $\left|\psi_n\right\rangle$ و E_n في المعادلة **(1)** نحصل على

$$\begin{aligned}&(H_0 + \lambda H')(|\psi_n^{(0)}> + \lambda|\psi_n^{(1)}> + \lambda^2|\psi_n^{(2)}> + \dots)\\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|\psi_n^{(0)}> + \lambda|\psi_n^{(1)}> + \lambda^2|\psi_n^{(2)}> + \dots)\end{aligned} \tag{4.7}$$

وبترتيب الحدود التي لها نفس معامل λ نحصل علي

$$\begin{aligned}&H_0|\psi_n^{(0)}> + \lambda(H'|\psi_n^{(0)}> + H_0|\psi_n^{(1)}>) + \lambda^2(H_0|\psi_n^{(2)}> + H'\psi_n^{(1)}>) + \dots\\ &= E_n^{(0)}|\psi_n^{(0)}> + \lambda(H_0|\psi_n^{(2)}> + E_n^{(0)}\psi_n^{(1)}>) + \lambda^2(E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}>\\ &+ E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}> + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}>) + \dots\end{aligned} \tag{4.8}$$

بمساواة معاملات λ^0 و λ و λ^2 في طرفي المعادلة أعلاه ، نحصل على

$$H_0 |\psi_n^{(0)}>= E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}> \qquad (4.9)$$

$$H' |\psi_n^{(0)} > + H_0 |\psi_n^{(1)} >= E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)} > + E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)} > \qquad (4.10)$$

$$H_0 |\psi_n^{(2)} > + H'\psi_n^{(1)} >= E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)} > + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)} > + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)} > \qquad (4.11)$$

المعادلة الأولى أعلاه هي نقطه البداية لنا في حل المشكلة .المعادلة الثانية يمكن حلها لإيجاد قيمة $E_n^{(1)}$ الذي يمثل تصحيح الرتبة الأولي للطاقة. ويتم ذلك بفك الدالة الموجية ذات الرتبة الأولى بدلاله الدوال الذاتية غير المضطربة $|\psi_i^{(0)} >$ أي $\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \sum_i a_{ni}\left|\psi_i^{(0)}\right\rangle$ فتصبح معادلة الرتبة الأولى:

$$H' |\psi_n^{(0)} > + H_0 \sum_i a_{ni} |\psi_i^{(0)} > = E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)} > + E_n^{(0)} \sum_i a_{ni} |\psi_i^{(0)} > \qquad (4.12)$$

بالضرب في $<\psi_k^{(0)} |$ نحصل على

$$< k | H' | n > + \sum_i a_{ni} E_k^{(0)} \delta_{k,n} = E_n^{(1)} \delta_{k,n} + \sum_i a_{ni} E_n^{(0)} \delta_{k,i}$$

$$< k | H' | n > + E_n^{(0)} \sum_i a_{ni} \delta_{k,i} = E_n^{(1)} < k | n > + E_n^{(0)} \sum_i a_{ni} < k | n >$$

$$< k | H' | n > + a_{nk} E_k^{(0)} = E_n^{(1)} \delta_{k,n} + a_{nk} E_n^{(0)} \qquad (4.13)$$

حيث كتبنا $| i >=| \psi_i^{(0)} >, | k >=| \psi_k^{(0)} >, | n >=| \psi_n^{(0)} >$. نلاحظ أن المقدار $< k | H' | n >$ يمثل عناصر لمصفوفة H بدلالة الدوال الذاتية غير المضطربة (unperturbed)($| n >, | k >$). وعليه نجد أن

$$< k | H' | n > + a_{nk} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) = E_n^{(1)} \delta_{k,n} \qquad (4.14)$$

فإذا كان $n = k$ نحصل على

$$E_n^{(1)} =< n | H' | n > \qquad (4.15)$$

وهذا يعنى أن التصحيح ذو الرتبة الأولى (first order correction) لطاقة المدار رقم n، $E_n^{(1)}$ هو مصفوفة قطريه. ويمثل متوسط (القيمة المتوقعة) مؤثر الاضطراب. وتصبح الطاقة الجديدة $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}$. وإذا كان $k \neq n$ فان المعادلة (4.14) تصبح $< k | H' | n > + a_{nk} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) = 0$ وهذا يعنى أن

$$a_{nk} = \frac{< k | H' | n >}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \qquad (4.16)$$

وبالتالي تصبح دالة الموجة مصححة للرتبة الأولي

$$\left|\psi_n\right\rangle = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \sum_{k\neq n} a_{nk}\psi_k^{(0)} = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \frac{<k|H'|n>}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle \tag{4.17}$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{k\neq n} a_{nk}\psi_k^{(0)} = \psi_n^{(0)} + \frac{<1|H'|n>}{E_n^{(0)}-E_1^{(0)}}\psi_2^{(0)} + \frac{<2|H'|n>}{E_n^{(0)}-E_2^{(0)}}\psi_2^{(0)} + ... \tag{4.18}$$

ولإيجاد التصحيح للرتبة الثانية فإننا نستعمل المعادلة (4.11)، أي

$$H_0|\psi_n^{(2)}> + H'\psi_n^{(1)} >= E_n^{(0)}|\psi_n^{(2)}> + E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}> + E_n^{(2)}|\psi_n^{(0)}>$$

ونكتب هذا التصحيح على الصورة

$$\left|\psi_n^{(2)}\right\rangle = \sum_j b_{nj}\left|\psi_j^{(0)}\right\rangle \tag{4.19}$$

(تذكر أن: $\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \sum_i a_{ni}\left|\psi_i^{(0)}\right\rangle$)

بالتعويض في المعادلة أعلاه ثم الضرب في $<k|$ للطرفين نحصل على

$$b_{nk}(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}) + \sum_i a_{ni} <k|H'|i> - a_{nk}E_n^{(1)} = E_n^{(2)}\delta_{k,n} \tag{4.20}$$

إذا كان $n = k$ نحصل على التصحيح للرتبة الثانية للطاقة

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_i a_{ni} <n|H'|i> - a_{nn}E_n^{(1)} \\ &= \sum_i a_{ni} <n|H'|i> - a_{nn} <n|H'|n> \\ &= \sum_{i\neq n} a_{ni} <n|H'|i> \end{aligned} \tag{4.21}$$

وبالتعويض عن a_{nk} من المعادلة (4.16) نحصل على

$$E_n^{(2)} = \sum_{i\neq n}\frac{|<n|H'|i>|^2}{E_n^{(0)}-E_i^{(0)}} \tag{4.22}$$

وتكون الطاقة مصححة للرتبة الثانية في الصورة

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \tag{4.23}$$

وللحصول على تصحيح الرتبة الثانية للدالة الذاتية نبحث عن حل فيه $k \neq n$ في المعادلة (4.20) أي

$$b_{nk}(E_k^{(0)}-E_n^{(0)})+\sum_i a_{ni}<k|H'|i>-a_{nk}E_n^{(1)}=0 \qquad (4.24)$$

ومنها نحصل على

$$b_{nk}=\sum_{i\neq n}\frac{<i|H'|n><i|H'|n>}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})(E_n^{(0)}-E_i^{(0)})}-\sum_{i\neq n}\frac{<k|H'|n><n|H'|n>}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2} \qquad (4.25)$$

ثم نستخدم المعادلة

$$\left|\psi_n^{(2)}\right\rangle=\sum_j b_{nj}\left|\psi_j^{(0)}\right\rangle$$

لنحصل على تصحيح دالة الموجة للرتبة الثانية.

وتكون دالة الموجة مصححة للرتبة الثانية (second order correction)

$$\left|\psi_n\right\rangle=\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle+\left|\psi_n^{(1)}\right\rangle+\left|\psi_n^{(2)}\right\rangle$$

من الواضح أن تصحيح للدوال الذاتية يصبح معقدا كلما صعدنا إلي الرتب العليا، ولهذا السبب نادراً ما تستخدم نظرية الاضطراب لتصحيح الدوال الذاتية اكثر من الرتبة الأولى ولتصحيح الطاقات اكثر من الرتبة الثانية.

4.2 تطبيقات طريقه الاضطراب لحالات ليست منحلة

دعنا نأخذ تأثير الحد اللا توافقي (anharmonic-term) على طاقة الحالة الأرضية (ground-state) لمهتز توافقي بسيط. يُعطى مؤثر هاملتون للمنظومة غير المضطربة بـ

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}k\ x^2 \qquad (4.26)$$

وتُعطي الطاقة للحالة غير المضطربة بـ $E_n^{(0)}=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ وتعطى الدوال الذاتية للحالة غير المضطربة بـ

$$\psi(x)_n=\left(\frac{1}{2^n n!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}H_n(x) \qquad (4.27)$$

حيث H_n دالة هيرمايت (Hermite) المعروفة.

و الآن إذا أضفنا حداً لاتوافقياً في صورة $b\,x^3$ لطاقة جهد المهتز يصبح مؤثر هاملتون في الصورة

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}k\ x^2 + b\ x^3 \qquad (4.28)$$

حيث $H' = b\,x^3$ يمكن اعتباره اضطراباً إذا كانت b صغيرة.

نعلم أن تصحيح الرتبة الأولى لطاقة الحالة الأرضية يُعطى بـ

$$E_0^{(0)} = < 0 | H' | 0 > = < \psi_0^{(0)} | bx^3 | \psi_0^{(0)} > = 0$$

وبم أن تصحيح الرتبة الأولى للطاقة صفرا يلزمنا إيجاد تصحيح الرتبة الثانية للطاقة والتي تُعطي بالمعادلة

$$E_0^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|< 0 | H' | i >|^2}{E_0^{(0)} - E_i^{(0)}}$$

حيث $< 0 | H' | i > = < 0 | bx^3 | i >$.

مما سبق لدراستنا للمهتز التوافقي البسيط نجد أن

$$\mathrm{x} = \sqrt{\frac{\mathrm{m}\omega}{2\hbar}}(\mathrm{a} + \mathrm{a}^+)$$

ومنها يصبح الحد x^3 في الصورة

$$x^3 = (\frac{m\omega}{2\hbar})^{3/2}(a + a^+)^3$$

$$x^3 = (\frac{m\omega}{2\hbar})^{3/2}[a^3 + (a^+)^3 + a^+a^2 + (a^+)^2 a + a^+aa^+ + a^2a^+ + a(a^+)^2 + aa^+a]$$

والان نجد أن

$$< i | H' | 0 > = (\frac{\hbar}{2m\omega\hbar})^{3/2} b < i | [a^3 + (a^+)^3 + a^+a^2 + (a^+)^2 a + a^+aa^+ + a^2a^+ + a(a^+)^2 + aa^+a] | 0 >$$

وبما أن $a | 0 > = 0$ فإن

$$< i | H' | 0 > = (\frac{\hbar}{2m\omega\hbar})^{3/2} b < i | [(a^+)^3 + a^+aa^+ + a^2a^+ + a(a^+)^2] | 0 >$$

$$< i | H' | 0 > = (\frac{\hbar}{2m\omega\hbar})^{3/2} b[\sqrt{6} < i | 3 > + 3 < i | 1 >]$$

نلاحظ أن قيم $i = 1,3$ فقط وذلك لان $< i | j > = \delta_{i,j}$ وعليه فإن

$$<1|H'|0>=3b(\frac{\hbar}{2m\omega\hbar})^{3/2},\quad <3|H_{\text{int.}}|0>=\sqrt{6}b(\frac{\hbar}{2m\omega\hbar})^{3/2}$$

ولكن

$$E_0^{(0)}=\tfrac{1}{2}\hbar\omega,\quad E_1^{(0)}=\tfrac{3}{2}\hbar\omega,\quad E_3^{(0)}=\tfrac{7}{2}\hbar\omega$$

وعليه فإن

$$E_0^{(2)}=\frac{9b^2(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}}{-\hbar\omega}+\frac{6b^2(\frac{\hbar}{2m\omega})^{\frac{3}{2}}}{-3\hbar\omega}=-\frac{11b^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}$$

ولحساب التصحيح في الرتبة الأولى لطاقة المدار $n=1$ (الحالة المثارة الأولى، نجد أن

$$E_1^{(0)}=<1|H'|1>$$

$$<1|H'|1>=(\frac{\hbar}{2m\omega\hbar})^{3/2}b<1|[a^3+(a^+)^3+a^+a^2+$$

$$(a^+)^2a+a^+aa^++a^2a^++a(a^+)^2+aa^+a]|1>$$

نلاحظ أن الحدود التي لا تغير الحالة $|1>$ هي التي تساهم ، أي $<1|H'|1>=0$.

ومن المعادلة (4.6) (بوضع $\lambda=1$) نجد أن

$$E_1=E_1^{(0)}+E_1^{(1)}+E_1^{(2)}$$

مثال (2)

سُلط اضطراب على مهتز توافقي بسيط مقداره $H' = V(a + a^{+})^{2}$ حيث V ثابت. أوجد مقدار تصحيح الطاقة من الرتبة الأولى للحالة المثارة الثانية.

الحل

تُعطي الحالة العامة للمؤثر بـ $|n>$ حيث $a|n>=\sqrt{n}\,|n-1>$ و $a^{+}|n>=\sqrt{n+1}\,|n+1>$. يُعطي تصحيح الرتبة الأولى للطاقة بـ

$$E_n^{(1)} = <n|H'|n> = <n|V(a+a^{+})^{2}|n>$$

$$E_n^{(1)} = V<n|(a^{2} + aa^{+} + a^{+}a + \left(a^{+}\right)^{2}|n>$$

$$E_n^{(1)} = V<n|(aa^{+} + a^{+}a)|n> = V<n|(1+2a^{+}a)|n>$$

$$E_n^{(1)} = V<n|(1+2N)|n> = V(1+2n)$$

حيث $a^{+}a = N$ و $N|n> = n|n>$ وكذلك $\left[a, a^{+}\right] = 1$ ومنها $aa^{+} = 1 + a^{+}a = 1 + N$. وللحالة المثارة الثانية $n = 2$ إذاً $E_n^{(1)} = 5V$.

مثال (3):

يُعطي مؤثر هاملتون الكلي لمنظومة مضطربة بـ

$$H = \begin{pmatrix} 1+\epsilon & \epsilon & 0 \\ \epsilon & 2 & 1+\epsilon \\ 0 & 1+\epsilon & 2 \end{pmatrix}$$

(أ) أوجد مصفوفة مؤثر الاضطراب.

(ب) احسب القيم الذاتية والدوال الذاتية المناظرة للمنظومة قبل الاضطراب.

(ج) أوجد مقدار الطاقة مصححة للرتبة الأولي لهذه المنظومة، ثم الدوال الذاتية المناظرة لها.

الحل

(أ) أولاً يمكن كتابة مؤثر هاملتون الكلي علي الصورة

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} + \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

حيث يُمثل الحد الأول مصفوفة هاملتون قبل الاضطراب والحد الثاني بعد الاضطراب ($H = H_0 + \varepsilon H'$) حيث

$$H' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ب- لإيجاد القيم الذاتية للمصفوفة H_0 نستخدم المعادلة المميزة

$$\begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0$$

ويكون حلها أن

$$|H_0 - \lambda I| = 0$$

أو

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

لنحصل علي

$$(1-\lambda)\left((2-\lambda)(2-\lambda)-1\right) = 0$$

أو

$$(1-\lambda)(1-\lambda)(\lambda-3) = 0$$

وتعني أن القيم الذاتية هي: $\lambda = 1, 1, 3$.

إذا كان $\lambda_1 = 1$ فإن المعادلة أعلاه تصبح

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0$$

والتي نجد منها أن

$c_1 = 0$ و $c_2 + c_3 = 0$ أو $c_2 = -c_3$.

ونعلم مما سبق أن

$|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ فإن $|c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ أو $|c_2|^2 + |c_2|^2 = 1$

$c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, c_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ وتصبح الدالة الذاتية

$$|\psi_1^{(0)}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\-1\end{pmatrix}$$

وكذلك عند $\lambda_2=1$ تكون

$$|\psi_2^{(0)}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\-1\end{pmatrix}$$

وبنفس الطريقة عند $\lambda_3=3$ نجد أن الدالة الذاتية تصبح

$$|\psi_3^{(0)}>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$$

و الآن نجد أن تصحيح الطاقة للرتبة الأولي يُعطي بالمعادلة

$$E_1^{(1)}=<\psi_1^{(0)}|H'|\psi_1^{(0)}>$$

$$E_2^{(1)}=<\psi_2^{(0)}|H'|\psi_2^{(0)}>$$

$$E_3^{(1)}=<\psi_3^{(0)}|H'|\psi_3^{(0)}>$$

ولتصحيح دالة الموجة للرتبة الأولي نكتب

$$|\psi_1^{(1)}>=\Sigma_{1\neq j}\frac{H'_{j1}}{E_1^{(0)}-E_j^{(0)}}|\psi_j^{(0)}>=\frac{H'_{12}}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}|\psi_2^{(0)}>+\frac{H'_{13}}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}|\psi_3^{(0)}>$$

و

$$|\psi_2^{(1)}>=\Sigma_{1\neq j}\frac{H'_{j2}}{E_2^{(0)}-E_j^{(0)}}|\psi_j^{(0)}>=\frac{H'_{12}}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}|\psi_1^{(0)}>+\frac{H'_{32}}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}|\psi_3^{(0)}>$$

و

$$|\psi_3^{(1)}>=\Sigma_{1\neq j}\frac{H'_{j3}}{E_3^{(0)}-E_j^{(0)}}|\psi_j^{(0)}>=\frac{H'_{13}}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}|\psi_1^{(0)}>+\frac{H'_{23}}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}|\psi_2^{(0)}>$$

حيث

$$H'_{12} =< \psi_1^{(0)}|H'|\psi_2^{(0)} >= -1$$

$$H'_{13} =< \psi_1^{(0)}|H'|\psi_3^{(0)} >= -0$$

$$H'_{23} =< \psi_2^{(0)}|H'|\psi_3^{(0)} >= 0$$

مثال (4):

إذا سُلط اضطراب علي الصورة

$$H_1 = \alpha\ \delta(x\ -\ a/2)$$

علي جسيم في بئر جهد مربعة لانهائية عرضها a، فأوجد

(أ) تصحيح الطاقة للرتبة الأولى.

(ب) تصحيح طاقة الرتبة الثانية.

نعلم أن دالة موجة الجسيم غير المضطربة تُعطي بـ

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \sin\ \left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

الحل

(أ) يُعطي تصحيح الطاقة للرتبة الأولى بالمعادلة

$$E_n^1 =< n\,|\,H\,|\,n >$$

وبم أن

$$H_1 = \alpha\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \qquad \text{and} \qquad \psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

نجد أن

$$E_n^1 = < n|H|n > = < \psi_n^0(x)|H|\psi_n^0(x)>$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\alpha\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,dx$$

أو

$$E_n^1 = \frac{2\alpha}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\,dx$$

ومنها نجد أن

$$E_n^1 = \frac{2\alpha}{a}\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\,dx = \frac{2\alpha}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}\frac{a}{2}\right)$$

حيث نحصل علي

$$E_n^1 = \frac{2\alpha}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

ولقيم n المختلفة نلاحظ الآتي

n	$\sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right)$	E_n^1
1	1	$2\alpha/a$
2	0	0
3	1	$2\alpha/a$
4	0	0
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

وبالتالي نجد انه إذا كان n عددا فرديا فإن $E_n^1 = \dfrac{2\alpha}{2}$ وإذا كان n زوجيا فإن $E_n^1 = 0$.

(ب) لحساب تصحيح الرتبة الثانية نوجد أولا المقدار $<m|H_1|n>$ وذلك من التكامل

$$<m|H_1|n> = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right)\alpha\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,dx$$

حيث نحصل علي

$$<m|H_1|n> = \frac{2\alpha}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right)\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,dx$$

الذي يُعطي المقدار

$$<m|H_1|n> = \frac{2\alpha}{a}\sin\left(\frac{m\pi}{2}\right)\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$$

ولقيم n و m المختلفة نجد أن

m	$\sin\left(\frac{m\pi}{2}\right)$	n	$\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)$
1	1	1	1
2	0	2	0
3	−1	3	−1
4	0	4	0
5	1	5	1
⋮	⋮	⋮	⋮

وبالتالي فإن

$$<m|H_1|n> = \frac{2\alpha}{a}\sin\left(\frac{m\pi x}{2}\right)\sin\left(\frac{n\pi x}{2}\right) = \frac{2\alpha}{a}(\pm 1)$$

أو

$$<m|H_1|n> = \pm\frac{2\alpha}{a}$$

ويكون تصحيح الطاقة للرتبة الثانية هو

$$E_n^2 = \sum_{\substack{m \\ m \neq n}} \frac{\left| <m|H_1|n> \right|^2}{E_n^0 - E_m^0} = \sum_{m \text{ odd}}{}' \frac{\left| \pm 2\alpha/a \right|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

وبالتعويض نجد أن

$$E_n^2 = \sum_{m \text{ odd}}{}' \frac{\left(2\alpha/a\right)^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

حيث علامة $'$ $\sum$ تعني ن الجمع يسري فقط علي الحدود إلى يكون فيها $m \neq n$. نعلم مما سبق أن طاقة الجسيم داخل بئر لانهائية عرضها a تُعطي بالمقدار

$$E_n = n^2\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)$$

حيث $n = 1, 2, 3, \ldots$ عدد صحيح. وبالتعويض عن هذه الطاقة في المعادلة أعلاه، نجد أن

$$E_n^2 = \sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{(2\alpha/a)^2}{n^2\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right) - m^2\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)}$$
$$= \frac{2ma^2}{\pi^2\hbar^2}\left(\frac{2\alpha}{a}\right)^2 \sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{1}{n^2 - m^2}$$

أو

$$E_n^2 = 2m\left(\frac{2\alpha}{\pi\hbar}\right)^2 \sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{1}{n^2 - m^2}$$

وبفحص المتسلسلة نجد أن

$$\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{1}{n^2 - m^2} = \sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{-1}{m^2 - n^2} = \sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{1}{2n}\frac{-2n}{m^2 - n^2}$$
$$= \frac{1}{2n}\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{m - 2n - m}{m^2 - n^2} = \frac{1}{2n}\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{m - n - m - n}{(m+n)(m-n)}$$
$$= \frac{1}{2n}\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \frac{(m-n) - (m+n)}{(m+n)(m-n)} = \frac{1}{2n}\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \left[\frac{(m-n)}{(m+n)(m-n)} - \frac{(m+n)}{(m+n)(m-n)}\right]$$
$$= \frac{1}{2n}\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \left[\frac{1}{(m+n)} - \frac{1}{(m-n)}\right].$$

ونجد أن

$$\frac{1}{2n}\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \left[\frac{1}{(m+n)} - \frac{1}{(m-n)}\right] = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{4} + \frac{1}{6} + \frac{1}{8} + \frac{1}{10} + \frac{1}{12} + \cdots - \frac{1}{2} - \frac{1}{4} - \frac{1}{6} - \frac{1}{8} - \frac{1}{10} - \frac{1}{12} - \cdots\right]$$

واخيراً نجد أن

$$\frac{1}{2n}\sum_{m\ \mathrm{odd}}{}' \left[\frac{1}{(m+n)} - \frac{1}{(m-n)}\right] = \frac{1}{2n}\left[-\frac{1}{2n}\right] = -\frac{1}{(2n)^2}$$

فإذا كان n عدد فردي فإن

$$E_{n\ \mathrm{odd}}^{2} = 2m\left(\frac{2\alpha}{\pi\hbar}\right)^{2}\left(-\frac{1}{(2n)^{2}}\right) = -8m\left(\frac{\alpha}{\pi\hbar}\right)^{2}\left(\frac{1}{4n^{2}}\right)$$

وعموما نجد أن

$$E_{n}^{2} = \sum_{\substack{m \\ m\neq n}} \frac{\left|<m|H_{1}|n>\right|^{2}}{E_{n}^{0}-E_{m}^{0}}$$

فلحركة المهتز التوافقي في بعد واحد يكون

$$H = H_{0}+H_{1} \quad \Rightarrow \quad H_{1} = \frac{1}{2}\epsilon k x^{2} \qquad \text{where} \qquad E_{n} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \quad E_{n}^{2} &= \sum_{m}{}' \frac{\left|<m|\frac{1}{2}\epsilon k x^{2}|n>\right|^{2}}{\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega} \\ &= \left(\frac{1}{2}\epsilon k\right)^{2}\sum_{m}{}' \frac{\left|<m|x^{2}|n>\right|^{2}}{n\hbar\omega+\frac{1}{2}\hbar\omega-m\hbar\omega-\frac{1}{2}\hbar\omega} \\ &= \frac{\epsilon^{2}k^{2}}{4\hbar\omega}\sum_{m}{}' \frac{\left|<m|x^{2}|n>\right|^{2}}{n-m}.\end{aligned}$$

أو علي صورة التكامل التالي

$$E_{n}^{2} = \frac{\epsilon^{2}k^{2}}{4\hbar\omega}\sum_{m}{}' \frac{1}{n-m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\psi_{m}^{0*}x^{2}\psi_{n}^{0}\right)^{2} dx.$$

ولإيجاد المقدار $<n|x^{2}|m>$ نكتب أولا x في الصورة

$$X_{\mathrm{op}} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\left(a+a^{\dagger}\right)$$

ومنها يكون

$$\Rightarrow \quad X_{\text{op}}^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\left(a+a^\dagger\right)\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\left(a+a^\dagger\right)$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + {a^\dagger}^2\right)$$

$$<m|x^2|n> = <m|\frac{\hbar}{2m\omega}\left(a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + {a^\dagger}^2\right)|n>$$

حيث نعلم أن

$$a|n> = \sqrt{n}|n-1>, \qquad \text{and} \qquad a^\dagger|n> = \sqrt{n+1}|n+1>$$

وبالتعويض نحصل علي

$$<m|a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + {a^\dagger}^2|n> = <m|a^2|n> + <m|aa^\dagger|n> + <m|a^\dagger a|n> + <m|{a^\dagger}^2|n>$$
$$= <m|a\sqrt{n}|n-1> + <m|a\sqrt{n+1}|n+1> + <m|a^\dagger\sqrt{n}|n-1> + <m|a^\dagger\sqrt{n+1}|n+1>$$
$$= \sqrt{n} <m|a|n-1> + \sqrt{n+1} <m|a|n+1> + \sqrt{n} <m|a^\dagger|n-1> + \sqrt{n+1} <m|a^\dagger|n+1>$$
$$= \sqrt{n} <m|\sqrt{n-1}|n-2> + \sqrt{n+1} <m|\sqrt{n+1}|n> + \sqrt{n} <m|\sqrt{n}|n> + \sqrt{n+1} <m|\sqrt{n+2}|n+2>$$
$$= \sqrt{n}\sqrt{n-1} <m|n-2> + (n+1) <m|n> + n <m|n> + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2} <m|n+2>$$
$$= \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2} + (n+1)\,\delta_{m,n} + n\,\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2}.$$

أو

$$<m|x^2|n> = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2}\right)$$

والآن فإن

$$E_n^2 = \frac{\epsilon^2 k^2}{4\hbar\omega}\sum_m{}' \frac{\left|<m|x^2|n>\right|^2}{n-m}$$

والذي يساوي

$$= \frac{\epsilon^2 k^2}{4\hbar\omega} \sum_m{}' \frac{\left|\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2}\right)\right|^2}{n-m}$$

$$= \frac{\epsilon^2 k^2 \hbar^2}{16 m^2 \omega^2} \sum_m{}' \frac{\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2}\right)^2}{n\hbar\omega - m\hbar\omega}.$$

ونعلم أن

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{k^2}{m^2} = \omega^4$$

لتصبح الطاقة مصححة للرتبة الثانية هي

$$E_n^2 = \frac{\epsilon^2 \hbar^2 \omega^2}{16} \sum_m{}' \frac{\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2}\right)^2}{\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

أو

$$E_n^2 = \frac{\epsilon^2 \hbar^2 \omega^2}{16\hbar\omega} \sum_m{}' \frac{\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2}\right)^2}{n-m}$$

ونجد أن المجموع أعلاه يساوي

$$\sum_m{}' \frac{\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2}\right)^2}{n-m} = \frac{(n+1)(n+2)}{n-m} = \frac{(n+1)(n+2)}{n-(n+2)}$$

فإذا كانت $n = m - 2$ فإن

$$\sum_m{}' \frac{\left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} + \sqrt{(n)(n-1)}\,\delta_{m,n-2}\right)^2}{n-m} = \frac{(n)(n-1)}{n-m} = \frac{(n)(n-1)}{n-(n-2)}$$

ونحصل علي

$$E_n^2 = \frac{\epsilon^2 \hbar\omega}{16}\left[\frac{(n+1)(n+2)}{n-(n+2)} + \frac{(n)(n-1)}{n-(n-2)}\right]$$

والذي يؤول إلى

$$\begin{aligned}
E_n^2 &= \frac{\epsilon^2\hbar\omega}{16}\left[\frac{n^2+3n+2}{n-n-2}+\frac{n^2-n}{n-n+2}\right] \\
&= \frac{\epsilon^2\hbar\omega}{16}\left[-\frac{n^2+3n+2}{2}+\frac{n^2-n}{2}\right] \\
&= \frac{\epsilon^2\hbar\omega}{16}\left[\frac{-n^2-3n-2+n^2-n}{2}\right] \\
&= \frac{\epsilon^2\hbar\omega}{16}\left[\frac{-4n-2}{2}\right] \\
&= -\frac{\epsilon^2\hbar\omega}{16}\left[2n+1\right]
\end{aligned}$$

لنحصل علي

$$E_n^2 = -\frac{1}{8}\epsilon^2\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

ولكن نجد في الحل التام أن

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2 \qquad \text{and} \qquad k'=(1+\epsilon)k \quad \Rightarrow \quad V(x)=\frac{1}{2}(1+\epsilon)kx^2=\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}\epsilon kx^2$$

ويمكن كتابة الطاقة المعدلة علي الصورة

$$\begin{aligned}
E_n' &= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega' = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{(1+\epsilon)k}{m}} \\
&= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k+\epsilon k}{m}} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\omega^2+\epsilon\omega^2} \\
&= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega(1+\epsilon)^{1/2}.
\end{aligned}$$

وإذا استخدمنا نظرية ذات الحدين لفك الجذر التربيعي نجد أن

$$\begin{aligned}
E_n' &= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left[1+\frac{1}{2}\epsilon+\frac{\left(\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}\right)}{2!}\epsilon^2+\frac{\left(\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)\epsilon^3}{3!}+\cdots\right] \\
&= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left[1+\frac{1}{2}\epsilon-\frac{1}{8}\epsilon^2+\frac{1}{16}\epsilon^3-\cdots\right]
\end{aligned}$$

وبم أننا نهتم بالحد الذي يحتوي على ε^2 (مصحح للرتبة الثانية) فإن

$$E_n^2 = -\frac{1}{8}\epsilon^2\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

وهي نفس النتيجة التي حصلنا عليها من طريقة التقريب أعلاه.

تمرين:

1- احسب تصحيح الرتبة الثانية لطاقة الحالة المثارة الأولى والثانية لمهتز توافقي نتيجة لوجود حد اضطراب bx^3 فيه. وكذلك أوجد دالة الموجة مصححة للرتبة الأولى نتيجة لوجود اضطراب bx^3 للحالة الأرضية والحالة المثارة الأولى لمهتز توافقي. (الإجابة: $E_2^{(2)} = -\dfrac{191b^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}$,

$E_1^{(2)} = -\dfrac{71b^2\hbar^2}{8m^3\omega^4}$)

2- أوجد تصحيحات الطاقة للحالة الأرضية للرتبة الأولي والثانية لمهتز ناشئ من اضطراب $H' = c\,x^4$ ، c ثابت. ($E_0^{(1)} = \frac{3c\hbar^2}{4m^2\omega^2}$, $E_1^{(1)} = \frac{15c\hbar^2}{4m^2\omega^2}$,

($E_2^{(1)} = \frac{39c\hbar^2}{4m^2\omega^2}$

3- أوجد مقدار الطاقة الأرضية والمثارة الأولى لمهتز توافقي مصححة إلي الرتبة الأولي في اضطراب $H' = c\,x^4$.

($E_0^{(1)} = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{3c\hbar^2}{4m^2\omega^2}(1 - \frac{7c\hbar}{2m^2\omega^3}), \quad E_1^{(1)} = \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{15c\hbar^2}{4m^2\omega^2}(1 - \frac{11c\hbar}{2m^2\omega^3})$)

4- احسب تصحيح الرتبة الأولى لطاقة الحالة الأرضية لمهتز توافقي نتيجة لاضطراب $H' = \mathrm{v}\exp(-\beta x^2)$ ، حيث v ثابت .

($E_0^{(1)} = \mathrm{v}\sqrt{\frac{\alpha}{\alpha + \beta}}, \quad \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}$)

5- يتحرك إلكترون حركة توافقية في بعد واحد (x-axis). إذا اثر عليه بمجال كهربي E في اتجاه حركته ، أوجد التغير في طاقته الأرضية و المثارة الأولى في وجود المجال الكهربي حيث ($H' = -e\,x\,E$).

(الإجابة: $E_0^{(1)} = E_1^{(1)} = 0, \quad E_0^{(2)} = E_1^{(2)} = -\frac{e^2E^2}{2m\omega^2}$)

6-استنبط التغير في طاقة مهتز توافقي للرتبة الثانية في وجود اضطراب bx^3 للمدار n.

$$\mathrm{E}_\mathrm{n}^{(2)} = -\frac{\mathrm{b}^2\hbar^2}{\mathrm{m}^3\omega^4}(30\mathrm{n}^2 + 30\mathrm{n} + 1)$$

7- احسب التصحيح النسبي للحالة الأرضية لذرة الهيدروجين بواسطة اضطراب يعطى بـ ($H' = -\frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^2$) ، حيث تُعطي دالة الحالة الأرضية والمؤثر ∇^2 بالمعادلتين

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}, \qquad \nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})$$

4.3 اضطراب الحالات المنحلة (Degenerate)

تُعرف الحالتان $\left|\psi_n^{(0)}\right\rangle$ و $\left|\psi_m^{(0)}\right\rangle$ بأنهما منحلتان إذا كانت لهما نفس الطاقة (مع العلم أن $n \neq m$)، أي $E_n^{(0)} = E_m^{(0)}$. وفى هذه الحالة تصبح المعادلة (..) لانهائية وبالتالي تفشل هذه الطريقة. ولإيجاد تصحيح الرتبة الأولي للطاقة نستخدم دوال مناسبة أخرى. نفترض أن الدالتان تحققان المعادلتين

$$H^{(0)}|\psi_n^{(0)}> = E^{(0)}|\psi_n^{(0)}> \tag{4.29}$$

و

$$H^{(0)}|\psi_m^{(0)}> = E^{(0)}|\psi_m^{(0)}> \tag{4.30}$$

حيث $\left\langle\psi_m^{(0)}\middle|\psi_n^{(0)}\right\rangle = \delta_{n,m}$. ونلاحظ أن الدالة

$$|\psi^{(0)}> = c_1|\psi_n^{(0)}> + c_2|\psi_m^{(0)}> \tag{4.31}$$

هي دالة ذاتية للمؤثر $H^{(0)}$ ، أي أن

$$H^{(0)}|\psi^{(0)}> = E^{(0)}|\psi^{(0)}> \tag{4.32}$$

بضرب طرفي المعادلة (..) بـ $\left\langle\psi_n^{(0)}\right|$ نحصل على

$$<\psi_n^{(0)}|H^{(0)}|\psi^{(1)}> + <\psi_n^{(0)}|H'|\psi^{(0)}> = E^{(0)}<\psi_n^{(0)}|\psi^{(1)}> + E^{(1)}<\psi_n^{(0)}|\psi^{(0)}> \tag{4.33}$$

بتعويض المعادلة (4.31) في المعادلة (4.33) نحصل على

$$c_1<\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}> + c_2<\psi_n^{(0)}|H'|\psi_m^{(0)}> = c_1E^{(1)} \tag{4.34}$$

وبنفس الخطوات نضرب المعادلة (..) بـ $\left\langle\psi_m^{(0)}\right|$ نحصل على

$$c_1<\psi_m^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}> + c_2<\psi_m^{(0)}|H'|\psi_m^{(0)}> = c_2E^{(1)} \tag{4.35}$$

ويمكن كتابة المعادلتين في الصورة المختصرة

$$\begin{pmatrix} H'_{nn} & H'_{mn} \\ H'_{mn} & H'_{mm} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E^{(1)}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{4.36}$$

حيث

$$H'_{nm} = \left\langle\psi_n^{(0)}\middle|H'\middle|\psi_m^{(0)}\right\rangle \text{ و } H'_{mm} = \left\langle\psi_m^{(0)}\middle|H'\middle|\psi_m^{(0)}\right\rangle \tag{4.37}$$

ويمكننا إيجاد الدوال الذاتية والقيم الذاتية المناظرة للمعادلة أعلاه. تُعطي القيم الذاتية للطاقة بـ

$$E_{\pm}^{(1)} = \tfrac{1}{2}H'_{mm} + \tfrac{1}{2}H'_{nn} \pm \tfrac{1}{2}\sqrt{\left((H'_{mm} - H'_{nn})^2 + 4H'^2_{nm}\right)} \qquad (4.38)$$

ونلاحظ أن الحالتين أصبحتا مختلفتان في الطاقة ($E_+ \neq E_-$)، ونقول بأن التحلل قد زال نتيجة وجود الاضطراب.

وإذا كانت العناصر الغير قطرية تساوي صفرا في المعادلة (..) فإن

$$E_+^{(1)} = H'_{mm} \text{ and } E_-^{(1)} = H'_{nn} \qquad (4.39)$$

وهي مطابقة لحالة الدوال الغير منحلة التي تعرضنا لها سابقا. ونحصل على الدالتين الذاتيتين باستخدام القيمتين الذاتيتين للطاقة أعلاه ($E_\pm$) بالطريقة المعروفة.

وعموما تكون الدالة الصفرية لمنظومة منحلة ذات M حالة علي الصورة

$$|v\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \ldots + c_M|M\rangle \qquad (4.40)$$

وتتكون من جمع كل الحالات الغير مضطربة

$$|\mathrm{v}\rangle = \sum_{n=1}^{m} c_n \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle \qquad (4.41)$$

حيث $\ldots$ $|1\rangle = \left|\psi_1^{(0)}\right\rangle, \quad |2\rangle = \left|\psi_2^{(0)}\right\rangle,$ و $c_1, c_2, \cdots$ هي معاملات تعمم المعادلة أعلاه. تُعطي القيم الذاتية المناظرة من المحددة التالية

$$\det\begin{vmatrix} H'_{11} - E_1^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1M} \\ H'_{21} & H'_{22} - E_1^{(1)} & \cdots & H'_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H'_{M1} & H'_{M2} & \cdots & H'_{MM} - E_1^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \qquad (4.42)$$

مثال (1):

سُلط مجال كهربي شدته ε في اتجاه المحور z على ذرة الهيدروجين بحيث أن الاضطراب الناتج من هذا المجال هو $\hat{H} = e\varepsilon z = e\varepsilon r\cos\theta$ حيث $z = r\cos\theta$.

(أ) أكتب مصفوفة هاملتون الكلية بعد الاضطراب

(ب) أوجد مقدار تصحيح الرتبة الأولي لطاقة الإلكترون إذا كان الإلكترون في الحالة المثارة الأولي.

الحل

نلاحظ أن الحالة الأرضية ليست منحلة ولكن نجد أن الحالة المثارة الأولي تتكون من أربعة حالات لها نفس الطاقة، أي تكون هذه الحالات منحلة. نعلم أن طاقة ذرة الهيدروجين تُعطي بـ $E_n = -\frac{13.6}{n^2}\, eV$ والدوال هي $\left|\psi_{n,\ell,m}\right\rangle$ حيث $n = 1,2,3,\cdots$ و $\ell = 0,1,\cdots,n-1$ و $m = \ell,\ell-1,\cdots,0,\cdots,-\ell$. وللحالة المثارة الأولي $n = 2$ وبالتالي نجد أن

$$\psi_{200} = \left(8\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_{210} = \left(8\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta$$

$$\psi_{211} = \left(\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{r}{8a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta e^{i\phi}$$

$$\psi_{21-1} = \left(\pi a_0^3\right)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{r}{8a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta e^{-i\phi}$$

نكتب مصفوفة هاملتون للاضطراب في الصورة

$$\begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} & H'_{13} & H'_{14} \\ H'_{21} & H'_{22} & H'_{23} & H'_{24} \\ H'_{31} & H'_{32} & H'_{33} & H'_{34} \\ H'_{41} & H'_{42} & H'_{43} & H'_{44} \end{pmatrix}$$

توصف هذه المنظومة بـالمعادلة

$$\begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} & H'_{13} & H'_{14} \\ H'_{21} & H'_{22} & H'_{23} & H'_{24} \\ H'_{31} & H'_{32} & H'_{33} & H'_{34} \\ H'_{41} & H'_{42} & H'_{43} & H'_{44} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = E^{(1)}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}$$

حيث $H'_{mn} = \left\langle\psi_{\ell,m}\middle|H'\middle|\psi_{\ell',m'}\right\rangle = \int \psi^*_{\ell,m}H'\psi_{\ell',m'}dV$ ، $dV = r^2\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ ، $\left|\psi_{n,\ell,m}\right\rangle = \left|\psi_{m,\ell}\right\rangle$.

وبالتعويض عن الدوال المختلفة نجد أن

$$\underbrace{H'_{11} = H'_{22} = H'_{33} = H'_{44}}_{\text{all } H'_{ii}=0} = H'_{34} = H'_{43} = 0$$

و

$$H'_{13} = H'_{14} = H'_{23} = H'_{24} = H'_{31} = H'_{41} = H'_{32} = H'_{42} = 0$$

والحدود الغير صفرية هي:

$$\begin{aligned} H'_{12} = H'_{21} &= \frac{e\mathcal{E}}{8\pi a_0^3}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\cos^2\theta \int_0^{\infty} dr \frac{r^2\cdot r^2}{2a_0}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{a_0}} \\ &= -3e\mathcal{E}a_0 \qquad\qquad \text{using } \int_0^{\infty} dr\, r^n \exp(-\lambda r) = \frac{n!}{\lambda^{n+1}} \end{aligned}$$

والان تصبح مصفوفة الاضطراب أعلاه في الصورة التالية:

$$\begin{pmatrix} 0 & -3e\epsilon a_0 & 0 & 0 \\ -3e\epsilon a_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ونحصل على تصحيح الرتبة الأولي من المعادلة $|H-\lambda I|=0$ التي تأخذ الصورة

$$\det\begin{vmatrix} -E^{(1)} & -3e\mathcal{E}a_0 & 0 & 0 \\ -3e\mathcal{E}a_0 & -E^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

والتي تُعطي المعادلة

$$\left(E^{(1)}\right)^2 - \left(\left(E^{(1)}\right)^2 - (3e\mathcal{E}a_0)^2\right) = 0$$

وحلها هو

$$E^{(1)} = +3e\mathcal{E}a_0,\ -3e\mathcal{E}a_0,\ 0,\ 0$$

ولمعرفة الدوال الذاتية المنظرة للقيم الذاتية أعلاه نستخدم المعادلة

$$\left[H'_{ij} - E^{(1)}_{ii}\right]\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

(أ) عندما $E^{(1)} = +3e\varepsilon a_0$ نجد أن $c_1 = -c_2;\ c_3 = c_4 = 0.$ ومنها تكون الدالة الذاتية

$$|v_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\underbrace{\left(|\psi_{200}\rangle - |\psi_{210}\rangle\right)}_{\left(|1\rangle - |2\rangle\right)}$$

(ب) عندما $E^{(1)} = -3e\varepsilon a_0$ نجد أن $c_1 = c_2;\ c_3 = c_4 = 0.$ ومنها تكون الدالة الذاتية

$$|v_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_{200}\rangle + |\psi_{210}\rangle\right)$$

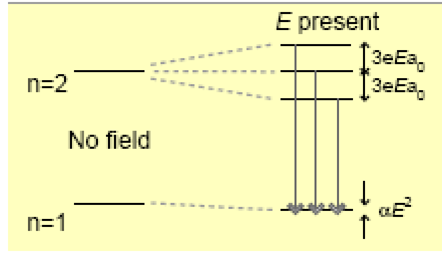
(ج) عندما $E^{(1)} = 0$ نجد أن $c_1 = c_2 = 0;\ c_3 = 1,\ c_4 = 0,$ وتكون الدالة الذاتية

$$|v_3\rangle = |3\rangle = |\psi_{211}\rangle$$

(د) عندما $E^{(1)} = 0$ نجد أن $c_1 = c_2 = 0;\ c_4 = 1,\ c_3 = 0.$ وتكون الدالة الذاتية

$$|v_4\rangle = |4\rangle = |\psi_{21-1}\rangle$$

وجميع هذه الدوال معايرة (normalized). وتُعرف هذه الظاهرة بظاهرة ستارك (Stark effect). ونلاحظ أن الحالات الأربعة المنحلة أُختزلت إلى ثلاث حالات، وبالتالي نري أن الانحلال قد رفع جزيئا. نجد أن الحالتين $|\psi_{2,1,1}\rangle$ و $|\psi_{2,1,-1}\rangle$ مازالتا منحلتين ولكن رُفع انحلال الحالتين $|\psi_{2,0,0}\rangle$ و $|\psi_{2,1,0}\rangle$ ، حيث زادت طاقة الأولي بمقدار $3e\varepsilon a_0$ ونقصت الأخرى بنفس المقدار عن الطاقة الأصلية. ونلاحظ أن الحالتين الجديدتين هما جمع خطي من الحالتين الأوليتين. ويوضح الشكل أدناه طبيعة هذا الانحلال.



مثال (2):

توصف منظومة بالدالتين الذاتيتين $|\psi_1^0>$ و $|\psi_2^0>$ بطـاقتين $E_1^0 = E_2^0 = 2$. إذا سُلط اضطراب علي هذه المنظومة مؤثره $H' = 0.1\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$، فأوجد المصفوفة $W = \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} \end{pmatrix}$، حيث $H'_{ij} =< \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 >$.

الحل

نوجد أولاً الحدود التالية:

$H'_{11} = \left\langle \psi_1^0 \middle| H' | \psi_1^0 \right\rangle$ و $H'_{12} = \left\langle \psi_1^0 \middle| H' | \psi_2^0 \right\rangle$ و $H'_{21} = \left\langle \psi_2^0 \middle| H' | \psi_1^0 \right\rangle$

و $H'_{22} = \left\langle \psi_2^0 \middle| H' | \psi_2^0 \right\rangle$ ثم نعوض في المعادلة (4.38) لنحصل علي الطاقاتين المصححتين.

تمرين:

(1) إذا كان مؤثر هاملتون الكلاسيكي لنظام فيزيائي كتلته تساوي الوحدة هو

$$H = \frac{1}{2}(\frac{dx}{dt})^2 + \frac{1}{2}kx^2 + \epsilon x$$

(أ) كوّن المؤثر الهيرميتى الكمي المقابل له في الصورة العامة

$$H = H_0 + H'$$

(ب) إذا كانت المنظومة الميكانيكية الكمية توصف بالدالة

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{3\sqrt{\pi}}}(2x^3 - 3x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

أوجد القيمة الذاتية $E^{(0)}$ المناظرة لهذه الحالة.

(ج) احسب القيمة الذاتية للمنظومة مصححة للرتبة الأولي للطاقة علي الصورة

$$E = E^{(0)} + \epsilon E^{(1)}$$

ثم اكتب الدالة الذاتية مصححة للرتبة الأولي في الصورة

$$\psi(x) = \psi^{(0)} + \epsilon\psi^{(1)}$$

(2) إذا كـان مـؤثر هـاملتون الكلـي فـي الشـكل المصـفوفي لمنظومـة مضـطربة يُعطي بـ

$$H = \begin{pmatrix} 1+\lambda & \lambda & 0 \\ \lambda & 2 & 1+\lambda \\ 0 & 1+\lambda & 2 \end{pmatrix}$$

(أ) اكتب مؤثر هاملتون الناتج من الاضطراب

(ب) أوجد القيمة الذاتية $E_n^{(0)}$ للمنظومة.

(ج) احسب القيم الذاتية للطاقة الناتجة من الاضطراب علي الصورة

$$E = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)}$$

والدوال الذاتية المقابلة لها في الصورة

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)}$$

(3) توصف منظومة بمؤثر هاملتون التالي

$$H = \begin{pmatrix} 2+\alpha & 1-\alpha \\ -(2-\alpha)-5 & -\alpha \end{pmatrix}$$

، حيث $\alpha << 1$.

(أ) اكتب مصفوفة الاضطراب H' .

(ب) اكتب مصفوفة الاضطراب H_0 .

(ج) احسب القيم الذاتية والقيم الذاتية المناظرة لـ H'.

(4) توصف منظومة بمؤثر هاملتون التالي

$$H = \begin{pmatrix} 3+\alpha & 2(1-\alpha) \\ 2(3-\alpha)-4 & -3\alpha \end{pmatrix}$$

، حيث $\alpha << 1$.

(أ) اكتب مصفوفة الاضطراب H' .

(ب) اكتب مصفوفة الاضطراب H_0 .

(ج) احسب القيم الذاتية والدوال الذاتية المناظرة لـ H'.

(5) توصف منظومة بمؤثر هاملتون التالي

$$H = \begin{pmatrix} 3.01 & 0 & 1.01 \\ 0 & 2.01 & -0.01 \\ 1.01 & -0.01 & 3 \end{pmatrix}$$

(أ) اكتب مصفوفة الاضطراب H' وما هي قيمة λ حيث $H = H_0 + \lambda H'$.

(ب) اكتب مصفوفة الاضطراب H_0 ومن ثم أوجد القيم الذاتية لها.

(ج) احسب القيم الذاتية والدوال الذاتية المناظرة لـ H'.

4.4 التقريب بالطريقة التغيرية (Variational Method)

تستخدم هذه الطريقة للحصول على حد (قيد) اعلي لطاقة الحالة الأرضية. وسبب استخدامها هو انه هنالك العديد من المسائل في ميكانيكا الكم لا يوجد لها حل كامل. وتجد هذه الطريقة تطبيقات في الميكانيكا الكلاسيكية والكمية. وترتبط ارتباط وثيق بحسان التغيرات. وتُستخدم هذه الطريقة لدراسة منظومة متعددة الجسيمات حيث يصعب إيجاد حل كامل لها. تعتمد هذه الطريقة على إيجاد دالة محاولة $|\psi\rangle$ ومن ثم إيجاد قيمة المقدار (متوسط الطاقة)

$$\frac{<\psi|\mathcal{H}|\psi>}{<\psi|\psi>}$$

حيث H هو مؤثر هاملتون للمنظومة تحت الدراسة. ويُمثل هذا حدا اعلي لطاقة الحالة الأرضية (E_0)، أي

$$E_0 \leq \frac{<\psi|\mathcal{H}|\psi>}{<\psi|\psi>}$$

فإذا كان اختيار دالة المحاولة موفقا فإننا نحصل على افضل حد اعلي لـ E_0. أما إذا كان اختيار الدالة غير جيد فسنحصل على حد اعلي لـ E_0 كبيرا. وتحتوي دالة المحاولة علي ثابت (وسيط) ما. وبتغيير متوسط الطاقة بالنسبة لهذا الوسيط نحصل علي قيمة لهذا الوسيط بدلالة ثوابت أخرى معلومة من المسالة. ومن ثم نعوض عن قيمة هذا الوسيط في متوسط الطاقة الذي حصلنا عليه سابقاً. وتصبح الطاقة مُعّرفة تماما بدلالة هذه الثوابت المعروفة من المسألة. يمكننا أن نكتب دالة $|\psi\rangle$ علي الصورة

$$|\psi> = \mathcal{I}|\psi> = \sum_i |E_i><E_i||\psi>$$

بدلالة قواعد الطاقة $|E_i\rangle$ حيث $I = \sum_i |E_i\rangle\langle E_i|$ هو مؤثر الإسقاط. ولتبسيط الحسابات نعتبر أن $|\psi\rangle$ دالة معايرة، أي $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ وبالتالي يكون

$$\begin{aligned}
\frac{<\psi|\mathcal{H}|\psi>}{<\psi|\psi>} &= <\psi|\mathcal{H}|\psi> \\
&= <\psi|\mathcal{I}|\mathcal{H}|\mathcal{I}|\psi> \\
&= <\psi|\sum_i |E_i><E_i||\mathcal{H}|\sum_j |E_j><E_j||\psi> \\
&= \sum_i \sum_j <\psi|E_i><E_i|\mathcal{H}|E_j><E_j|\psi> \\
&= \sum_i \sum_j <\psi|E_i><E_i|E_j|E_j><E_j|\psi> \\
&= \sum_i \sum_j <\psi|E_i> E_j <E_i|E_j><E_j|\psi> \\
&= \sum_i \sum_j <\psi|E_i> E_j \delta_{ij} <E_j|\psi> \\
&= \sum_i <\psi|E_i> E_i <E_i|\psi> \\
&= \sum_i E_i \Big| <E_i|\psi> \Big|^2.
\end{aligned}$$

وبم أن للحالة الأرضية هي أقل طاقة للمنظومة فإن $E_i \geq E_0$ لكل قيم E_i للمنظومة وبالتالي فإن

$$\sum_i E_i \left| <E_i|\psi> \right|^2 \geq \sum_i E_0 \left| <E_i|\psi> \right|^2$$
$$= E_0 \sum_i \left| <E_i|\psi> \right|^2$$
$$= E_0,$$

إذا

$$<\psi|\mathcal{H}|\psi> \geq E_0$$

لأي $|\psi\rangle$.

مثال (1):

بئر جهد لانهائي عرضه له جدران عند L و $-L$. أوجد طاقة الحالة الأرضية لجسم يتحرك حرا ($V = 0$) داخل البئر. باختيار دالة المحاول علي الصورة

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right)$$

الحل

سنحصل هنا على طاقة الحالة الأرضية بالضبط وذلك لأننا استخدمنا دالة الحالة الأرضية الصحيحة كدالة محاولة. ونعلم مما سبق أن هذه الدالة معايرة. وبم أن $H = T + V$ فإن

$$\begin{aligned}
<\psi|\mathcal{H}|\psi> &= <\psi|\mathcal{T}|\psi> \\
&= \int_{-L}^{L} \sqrt{\frac{1}{L}} \cos^* \left(\frac{\pi x}{2L}\right) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right) \sqrt{\frac{1}{L}} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right)\, dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2mL} \int_{-L}^{L} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \frac{d^2}{dx^2} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2mL} \int_{-L}^{L} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \frac{d}{dx} \left(-\sin\left(\frac{\pi x}{2L}\right)\frac{\pi}{2L}\right) dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2mL} \int_{-L}^{L} \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \left(-\cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right)\frac{\pi^2}{4L^2}\right) dx \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^3} \int_{-L}^{L} \cos^2\left(\frac{\pi x}{2L}\right) dx.
\end{aligned}$$

وباستعمال التكامل

$$\int \cos^2(ax)\, dx = \frac{1}{2}x + \frac{1}{4a}\sin(2ax)$$

حيث $a = \frac{\pi}{2L}$ لمسألتنا أعلاه نحصل علي

$$\begin{aligned}
<\psi|\mathcal{H}|\psi> &= \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^3}\left[\frac{1}{2}x + \frac{2L}{4\pi}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\right]_{-L}^{L} \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^3}\left[\frac{1}{2}L + \frac{2L}{4\pi}\sin(\pi) - \frac{1}{2}(-L) - \frac{2L}{4\pi}\sin(-\pi)\right] \\
&= \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^3}\left[\frac{1}{2}L + 0 + \frac{1}{2}L - 0\right]
\end{aligned}$$

واخيرا نجد أن

$$<\psi|\mathcal{H}|\psi> = \frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}$$

وهي طاقة الحالة الأرضية بالضبط كما سبق وان أوجدناها.

مثال (2):

خذ لحركة الجسم دالة جهد $V=\alpha x^6$ ودالة المحاولـة $\psi = A e^{-bx^2}$ حيث α, b, A ثوابت. الجدير بالذكر، أنـه عنـدما تُكتـب V بدلالـة x فـإن دالـة طاقـة الجهـد لا تكــون مــؤثر. نقــوم بتغييــر الثابــت b فــي دالــة الموجــة باعتبــاره وســيطا (parameter).

<u>الحل</u>

أولاً نقوم بمعايرة الدالة ψ لإيجاد قيمة الثابت A وذلك على النحو التالي

$$<\psi|\psi> = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(Ae^{-bx^2}\right)^* Ae^{-bx^2}\, dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\, dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

حيث نجد أن

$$A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

ويكون متوسط الطاقة

$$<\psi\left|\mathcal{H}\right|\psi> = <\psi\left|\mathcal{T}\right|\psi> + <\psi\left|\mathcal{V}\right|\psi>$$

ويُعطي الحد الأول المقدار

$$<\psi\left|\mathcal{T}\right|\psi> = \int_{-\infty}^{\infty} \left(Ae^{-bx^2}\right)^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right) Ae^{-bx^2}\, dx = -|A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2} e^{-bx^2}\, dx$$

وبالتعويض عن المشتقة الثانية في التكامل بالمقدار

$$\frac{d^2}{dx^2}e^{-bx^2} = \frac{d}{dx}\left(-2bxe^{-bx^2}\right) = -2b\left(e^{-bx^2} + x(-2bx)e^{-bx^2}\right) = -2be^{-bx^2} + 4b^2x^2e^{-bx^2}$$

يصبح التكامل علي الصورة

$$\begin{aligned}
<\psi\left|\mathcal{T}\right|\psi> &= -|A|^2 \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2}\left(-2be^{-bx^2} + 4b^2x^2e^{-bx^2}\right) dx \\
&= -|A|^2 \frac{\hbar^2}{2m}\left[-2b\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\, dx + 4b^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2}\, dx\right] \\
&= -|A|^2 \frac{\hbar^2}{2m}\left[-2b\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\, dx + 8b^2 \int_{0}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2}\, dx\right]
\end{aligned}$$

وبم أن

$$\int_0^\infty x^{2n}e^{-px^2}\,dx = \frac{(2n-1)\cdots5\cdot3\cdot1}{2(2p)^n}\sqrt{\frac{\pi}{p}} \quad \text{for} \quad p>0, \quad \text{and} \quad n=0,1,2,3,\ldots,$$

$$\begin{aligned} <\psi|\mathcal{T}|\psi> &= -\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\frac{\hbar^2}{2m}\left[-2b\sqrt{\frac{\pi}{2b}}+8b^2\frac{1}{2(2\cdot2b)}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left[2b\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}-b\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right] = \frac{\hbar^2}{2m}[2b-b] \end{aligned}$$

أخيرا نجد أن

$$<\psi|\mathcal{T}|\psi> = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

والان نجد أن الحد الثاني يصبح

$$<\psi|V|\psi> = \int_{-\infty}^{\infty}\left(Ae^{-bx^2}\right)^*\left(\alpha x^6\right)Ae^{-bx^2}\,dx = \alpha A^2\int_{-\infty}^{\infty}x^6e^{-2bx^2}\,dx = 2\alpha A^2\int_0^\infty x^6e^{-2bx^2}\,dx$$

أي

$$<\psi|V|\psi> = 2\alpha A^2\int_0^\infty x^6e^{-2bx^2}\,dx = 2\alpha\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\frac{5\cdot3\cdot1}{2(2\cdot2b)^3}\sqrt{\frac{\pi}{2b}} = \frac{15\alpha}{64b^3}$$

وبالرجوع لمعادلة متوسط الطاقة نحصل علي

$$<\psi|\mathcal{H}|\psi> = <\psi|\mathcal{T}|\psi> + <\psi|V|\psi> = \frac{\hbar^2 b}{2m}+\frac{15\alpha}{64b^3}$$

وبإجراء التفاضل لمتوسط هذه الطاقة بالنسبة للوسيط b نجد أن

$$\frac{d}{db}\left(\frac{\hbar^2}{2m}b+\frac{15\alpha}{64}b^{-3}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}-3\frac{15\alpha}{64}\frac{1}{b^4}=0$$

وتعني أن

$$b_0^4 = \frac{45\alpha}{64}\frac{2m}{\hbar^2} = \frac{45\alpha}{32}\frac{m}{\hbar^2}$$

أو

$$b_0 = \left(\frac{3^2\cdot5\cdot\alpha m}{2^5\hbar^2}\right)^{1/4}$$

وبالتعويض عن هذه القيمة في معادلة متوسط الطاقة نحصل على

$$<\psi|\mathcal{H}|\psi>_{\min} = <\psi|T|\psi>\Big|_{b_0} + <\psi|V|\psi>\Big|_{b_0} = \frac{\hbar^2 b_0}{2m} + \frac{15\alpha}{64 b_0^3}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3^2\cdot 5\cdot \alpha m}{2^5\hbar^2}\right)^{1/4} + \frac{3\cdot 5\cdot \alpha}{2^6}\left(\frac{2^5\hbar^2}{3^2\cdot 5\cdot \alpha m}\right)^{3/4}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{3^{1/2}5^{1/4}\alpha^{1/4}m^{1/4}}{2^{5/4}\hbar^{1/2}} + \frac{3\cdot 5\cdot \alpha}{2^6}\frac{2^{15/4}\hbar^{3/2}}{3^{3/2}5^{3/4}\alpha^{3/4}m^{3/4}}$$

$$= \frac{3^{1/2}5^{1/4}\cdot \alpha^{1/4}\hbar^{3/2}}{2^{9/4}m^{3/4}} + \frac{5^{1/4}\alpha^{1/4}\hbar^{3/2}}{2^{9/4}3^{1/2}m^{3/4}}.$$

والتي يمكن كتابتها في الصورة

$$<\psi|\mathcal{H}|\psi>_{\min} = \frac{5^{1/4}\alpha^{1/4}\hbar^{3/2}}{2^{1/4}3^{1/2}m^{3/4}}\left(\frac{3+1}{4}\right) = \left(\frac{5\alpha\hbar^6}{2\cdot 3^2 m^3}\right)^{1/4}$$

والتي تعني أن

$$E_0 \le \left(\frac{5\alpha\hbar^6}{18m^3}\right)^{1/4}$$

مثال (3):

احسب الحد الأعلى لطاقة الحالة الأرضية لجسم في جهد خطي $V = \alpha\,|\,x\,|$ وفي جهد رباعي $V = \alpha\, x^4$ مستخدما دالة المحاولة $\psi = A e^{-bx^2}$.

الحل

نحسب أولاً ثابت المعايرة A من المعادلة $\langle\psi|\psi\rangle = 1$، أي

$$<\psi|\psi> = 1 = \int_{-\infty}^{\infty}\left(Ae^{-bx^2}\right)^* Ae^{-bx^2}\,dx = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2}\,dx = |A|^2\sqrt{\frac{\pi}{2b}}$$

لنحصل على

$$A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

نحسب أولاً متوسط طاقة الحركة

$$\langle T\rangle = \langle\psi|T|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left(Ae^{-bx^2}\right)^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)Ae^{-bx^2}\,dx = -|A|^2\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-bx^2}\frac{d^2}{dx^2}e^{-bx^2}\,dx$$

أو

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= -|A|^2\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-bx^2}\left(-2be^{-bx^2}+4b^2x^2e^{-bx^2}\right)\,dx\\ &= -|A|^2\frac{\hbar^2}{2m}\left[-2b\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2bx^2}\,dx+4b^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-bx^2}\,dx\right]\\ &= -\left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/2}\frac{\hbar^2}{2m}\left[-2b\sqrt{\frac{\pi}{2b}}+4b^2\frac{1}{2(2b)}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right]\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left[2b\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}-b\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right] = \frac{\hbar^2}{2m}\left[2b-b\right]\end{aligned}$$

حيث عوضنا عن $\frac{d^2}{dx^2}e^{-bx^2}$ المقدار

$$\frac{d^2}{dx^2}e^{-bx^2} = \frac{d}{dx}\left(-2bxe^{-bx^2}\right) = -2b\left(e^{-bx^2}+x(-2bx)e^{-bx^2}\right) = -2be^{-bx^2}+4b^2x^2e^{-bx^2}$$

واستعملنا التكامل القياسي

$$\int_0^{\infty}x^{2n}e^{-px^2}\,dx = \frac{(2n-1)\cdots5\cdot3\cdot1}{2(2p)^n}\sqrt{\frac{\pi}{p}}\quad\text{for}\quad p>0,\quad\text{and}\quad n=0,1,2,3,\ldots$$

وبالتالي نحصل على

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

والان نحسب متوسط طاقة الجهد

$$\langle V\rangle = \langle\psi|V|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left(Ae^{-bx^2}\right)^*(\alpha|x|)\,Ae^{-bx^2}\,dx = \alpha A^2\int_{-\infty}^{\infty}|x|e^{-2bx^2}\,dx = 2\alpha A^2\int_0^{\infty}xe^{-2bx^2}\,dx$$

مع العلم بأن

$$\int_0^\infty x^{2n+1}e^{-px^2}\,dx = \frac{n!}{2p^{n+1}} \quad \text{for} \quad p>0, \quad \text{and} \quad n=0,1,2,3,\ldots,$$

نجد أن

$$\langle V\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}}$$

واخيرا نحصل على متوسط الطاقة الكلية

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}}$$

ولإيجاد قيمة الوسيط b نستخدم المعادلة

$$\frac{\partial}{\partial b}\left(\frac{\hbar^2}{2m}b + \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}b^{-1/2}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{1}{2}\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{b^{3/2}} = 0$$

التي يُعطي حلها قيمة b التي تُعطي أقل طاقة على النحو

$$b_0^{3/2} = \frac{\alpha}{2\sqrt{2\pi}}\frac{2m}{\hbar^2} = \frac{\alpha m}{\sqrt{2\pi}\hbar^2}$$

أو

$$b_0 = \left(\frac{\alpha m}{\sqrt{2\pi}\hbar^2}\right)^{2/3}$$

وبالتعويض في معادلة متوسط الطاقة

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle &= \frac{\hbar^2 b_0}{2m} + \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b_0}} \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\alpha m}{\sqrt{2\pi}\hbar^2}\right)^{2/3} + \frac{\alpha}{\left[2\pi\left(\frac{\alpha m}{\sqrt{2\pi}\hbar^2}\right)^{2/3}\right]^{1/2}} \\
&= \frac{\hbar^2\alpha^{2/3}m^{2/3}}{m2^{4/3}\pi^{1/3}\hbar^{4/3}} + \frac{\alpha 2^{1/6}\pi^{1/6}\hbar^{2/3}}{2^{1/2}\pi^{1/2}\alpha^{1/3}m^{1/3}} \\
&= \frac{1}{2}\frac{\hbar^{2/3}\alpha^{2/3}}{2^{1/3}\pi^{1/3}m^{1/3}} + \frac{\hbar^{2/3}\alpha^{2/3}}{2^{1/3}\pi^{1/3}m^{1/3}}
\end{aligned}$$

أو

$$\langle H\rangle_{\min} = \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\pi m}\right)^{1/3}$$

وفى الحالة الثانية حيث $V = \alpha\, x^4$ نجد أن متوسط طاقة الجهد

$$\langle V\rangle = \langle\psi|V|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left(Ae^{-bx^2}\right)^*\left(\alpha x^4\right)Ae^{-bx^2}\,dx = \alpha A^2\int_{-\infty}^{\infty}x^4e^{-2bx^2}\,dx$$
$$= 2\alpha A^2\int_0^{\infty}x^4e^{-2bx^2}\,dx\,.$$

وباستعمال التكامل التالي

$$\int_0^{\infty}x^{2n}e^{-px^2}\,dx = \frac{(2n-1)\cdots5\cdot3\cdot1}{2(2p)^n}\sqrt{\frac{\pi}{p}}\quad\text{for}\quad p>0,\quad\text{and}\quad n=0,1,2,3,\ldots$$

نحصل علي

$$\langle V\rangle = \frac{3\alpha}{16b^2}$$

ويصبح متوسط الطاقة

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{3\alpha}{16b^2}$$

وبإجراء التفاضل بالنسبة للوسيط b نحصل علي

$$\frac{d}{db}\left(\frac{\hbar^2}{2m}b + \frac{3\alpha}{16}b^{-2}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} - 2\frac{3\alpha}{16}\frac{1}{b^3} = 0$$

لنجد أن

$$b_0^3 = \frac{3\alpha}{8}\frac{2m}{\hbar^2}$$

وبالتعويض في المعادلة أعلاه نحصل علي أقل طاقة

$$\begin{aligned}\langle H\rangle_{\min} &= \langle T\rangle + \langle V\rangle = \frac{\hbar^2 b_0}{2m} + \frac{3\alpha}{16 b_0^2}\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\alpha m}{4\hbar^2}\right)^{1/3} + \frac{3\alpha}{16}\left(\frac{4\hbar^2}{3\alpha m}\right)^{2/3}\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{3^{1/3}\alpha^{1/3}m^{1/3}}{4^{1/3}\hbar^{2/3}} + \frac{3\alpha}{16}\frac{4^{2/3}\hbar^{4/3}}{3^{2/3}\alpha^{2/3}m^{2/3}}\\ &= \frac{1}{2}\frac{\hbar^{4/3}3^{1/3}\alpha^{1/3}}{m^{2/3}4^{1/3}} + \frac{1}{4}\frac{\hbar^{4/3}3^{1/3}\alpha^{1/3}}{m^{2/3}4^{1/3}}\end{aligned}$$

واخيرا نحصل على

$$\langle H\rangle_{\min} = \frac{3}{4}\left(\frac{3\alpha\hbar^4}{4m^2}\right)^{1/3}$$

مثال (4):

مستخدما الطريقة التغيرية احسب الحد الأعلى لطاقة الحالة الأرضية لمهتز توافقي بسيط طاقة جهده $V = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ، مستخدما دالة المحاولة

$$\psi(x) = |\psi(x)> = A\left(x^2+b^2\right)^{-1}$$

الحل

نوجد أولاً ثابت المعايرة A من الشرط $\langle\psi|\psi\rangle = 1$، أي

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{A}{(x^2+b^2)}\right)^*\left(\frac{A}{(x^2+b^2)}\right)dx = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{(x^2+b^2)^2} = 2|A|^2\int_0^{\infty}\frac{dx}{(x^2+b^2)^2} = 1$$

وباستخدام التكامل

$$\int_0^{\infty}\frac{dx}{(x^2+a^2)(x^2+c^2)} = \frac{\pi}{2ac(a+c)}$$

نجد أن

$$2|A|^2\int_0^{\infty}\frac{dx}{(x^2+b^2)^2} = \frac{2|A|^2\pi}{2b\cdot b(b+b)} = \frac{|A|^2\pi}{2b^3} = 1 \quad\Rightarrow\quad |A|^2 = \frac{2b^3}{\pi}$$

أو

$$A = \left(\frac{2b^3}{\pi}\right)^{1/2}$$

الآن نوجد متوسط طاقة الحركة للجسم

$$\langle T\rangle = \langle\psi|T|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{A}{(x^2+b^2)}\right)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\left(\frac{A}{(x^2+b^2)}\right)dx.$$

حيث

$$\frac{d}{dx}\left(x^2+b^2\right)^{-1} = -1\left(x^2+b^2\right)^{-2}2x = -2x\left(x^2+b^2\right)^{-2}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\left(x^2+b^2\right)^{-1} = \frac{d}{dx}\left(-2x\left(x^2+b^2\right)^{-2}\right) = -2\left(x^2+b^2\right)^{-2} - 2x\left(x^2+b^2\right)^{-3}(-2)(2x)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2}\left(x^2+b^2\right)^{-1} = \frac{-2}{\left(x^2+b^2\right)^2} + \frac{8x^2}{\left(x^2+b^2\right)^3}\ .$$

وبالتالي نجد أن

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= -\frac{A^2\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{1}{(x^2+b^2)}\right)\left(\frac{-2}{\left(x^2+b^2\right)^2}+\frac{8x^2}{\left(x^2+b^2\right)^3}\right)dx\\ &= \frac{A^2\hbar^2}{2m}\left[-8\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2\,dx}{\left(x^2+b^2\right)^4}+2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\left(x^2+b^2\right)^3}\right]\\ &= \frac{A^2\hbar^2}{2m}\left[-16\int_0^{\infty}\frac{x^2\,dx}{\left(x^2+b^2\right)^4}+4\int_0^{\infty}\frac{dx}{\left(x^2+b^2\right)^3}\right].\end{aligned}$$

وباستخدام التكامل القياسي

$$\int_0^{\infty}\frac{x^{\mu-1}\,dx}{\left(p+qx^{\nu}\right)^{n+1}} = \frac{1}{\nu p^{n+1}}\left(\frac{p}{q}\right)^{\mu/\nu}\frac{\Gamma\left(\frac{\mu}{\nu}\right)\Gamma\left(1+n-\frac{\mu}{\nu}\right)}{\Gamma(1+n)} \quad \text{for} \quad 0<\frac{\mu}{\nu}<n+1,\ p\neq 0,\ \text{and}\ \ q\neq 0.$$

نحصل علي

$$-16\frac{A^2\hbar^2}{2m}\int_0^\infty \frac{x^2\,dx}{\left(x^2+b^2\right)^4} = -16\frac{A^2\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{2\cdot b^{2(3+1)}}\left(\frac{b^2}{1}\right)^{3/2}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(1+3-\frac{3}{2}\right)}{\Gamma(1+3)}\right]$$

$$= -4\frac{A^2\hbar^2}{m}\cdot\frac{b^3}{b^8}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma(4)} = -\frac{4A^2\hbar^2}{mb^5}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma(4)}$$

حيث

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi},\quad \Gamma(1)=\Gamma(2)=1,\quad \Gamma(n+1)=n!,\quad \text{and}\quad \Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)=\frac{(2n-1)\cdots5\cdot3\cdot1}{2^n}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$$

فنجد أن

$$-\frac{4A^2\hbar^2}{mb^5}\cdot\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}{\Gamma(4)} = -\frac{4A^2\hbar^2}{mb^5}\cdot\frac{\left(\frac{1\cdot\sqrt{\pi}}{2}\right)\left(\frac{3\cdot1\cdot\sqrt{\pi}}{4}\right)}{3\cdot2\cdot1} = -\frac{\pi A^2\hbar^2}{4mb^5}$$

ويمكننا استخدام التكامل

$$\int_0^\infty \frac{dx}{\left(x^2+a^2\right)^n} = \frac{(2n-3)!!}{2(2n-2)!!}\frac{\pi}{a^{2n-1}}$$

نجد أن

$$4\frac{A^2\hbar^2}{2m}\int_0^\infty \frac{dx}{\left(x^2+b^2\right)^3} = \frac{2A^2\hbar^2}{m}\frac{3\cdot1}{2(4\cdot2)}\cdot\frac{\pi}{b^5} = \frac{3\pi A^2\hbar^2}{8mb^5}$$

وبجمع الحدين في التكامل السابق نحصل علي

$$\langle T\rangle = -\frac{\pi A^2\hbar^2}{4mb^5}+\frac{3\pi A^2\hbar^2}{8mb^5} = \frac{2b^3}{\pi}\left[-\frac{\pi\hbar^2}{4mb^5}+\frac{3\pi\hbar^2}{8mb^5}\right] = 2b^3\hbar^2\left[-\frac{2}{8mb^5}+\frac{3}{8mb^5}\right]$$

وأخيرا نجد أن

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{4mb^2}$$

يُعطي متوسط طاقة الجهد V بالمعادلة

$$\begin{aligned}
\langle V\rangle = \langle\psi|V|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{A}{(x^2+b^2)}\right)\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\left(\frac{A}{(x^2+b^2)}\right)dx \\
&= \frac{A^2m\omega^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2\,dx}{\left(x^2+b^2\right)^2} \\
&= A^2m\omega^2\int_{0}^{\infty}\frac{x^2\,dx}{\left(x^2+b^2\right)^2}.
\end{aligned}$$

نجد أن

$$\begin{aligned}
A^2m\omega^2\int_0^\infty\frac{x^2\,dx}{\left(x^2+b^2\right)^2} &= \frac{A^2m\omega^2}{2\cdot b^{2(1+1)}}\left(\frac{b^2}{1}\right)^{3/2}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(1+1-\frac{3}{2}\right)}{\Gamma(1+1)} \\
&= m\omega^2\left(A^2\right)\frac{b^3}{2\cdot b^4}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(2)} \\
&= m\omega^2\left(\frac{2b^3}{\pi}\right)\frac{b^3}{2\cdot b^4}\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(2)} \\
&= \frac{m\omega^2b^2}{\pi}\frac{\frac{\sqrt{\pi}}{2}\sqrt{\pi}}{1}
\end{aligned}$$

ونحصل علي متوسط طاقة الجهد

$$\langle V\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2b^2$$

وبالتعويض في معادلة متوسط الطاقة وبإجراء التفاضل بالنسبة للوسيط b نجد أن

$$\frac{\partial}{\partial b}\left(\frac{\hbar^2}{4mb^2}+\frac{1}{2}m\omega^2b^2\right) = -\frac{\hbar^2}{2mb^3}+m\omega^2b = 0$$

التي تنتج

$$b_0^4 = \frac{\hbar^2}{2m^2\omega^2}$$

أو

$$b_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\,m\omega}$$

وتصبح أقل طاقة للجسم في الحالة الأرضية

$$\begin{aligned}\langle H\rangle_{\min} &= \frac{\hbar^2}{4mb_0^2}+\frac{1}{2}m\omega^2 b_0^2\\ &= \frac{\hbar^2}{4m(\hbar/\sqrt{2}m\omega)}+\frac{1}{2}m\omega^2(\hbar/\sqrt{2}m\omega)\\ &= \frac{\sqrt{2}\hbar\omega}{4}+\frac{\hbar\omega}{2\sqrt{2}}\\ &= \left(\frac{\sqrt{2}}{4}+\frac{\sqrt{2}}{4}\right)\hbar\omega=\frac{2\sqrt{2}}{4}\hbar\omega\end{aligned}$$

أو

$$\langle H\rangle_{\min}=\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\omega$$

نعلم مما سبق أن طاقة الحالة الأرضية للمهتز التوافقي الكاملة هي $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ فلو كان قد استخدمنا دالة محاولة أخرى لحصلنا على هذا المقدار بالضبط.

مثال (5):

أوجد أقل طاقة الحالة الأرضية لمهتز توافقي بسيط طاقة جهده $V=\frac{1}{2}kx^2$ مستخدما دالة المحاولة $\psi = Ae^{-\alpha x^2}$، حيث $-\infty < x < \infty$.

الحل

نقوم أولاً بمعايرة الدالة لإيجاد ثابت المعايرة A. وتُعطي المعايرة بالمعادلة

$$<\psi|\psi>=\int_{-\infty}^{\infty}A^*e^{-\alpha x^2}Ae^{-\alpha x^2}dx=1$$

$$A^2 \int_{\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx = 1$$

ويكون ثابت المعايرة

$$A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = 1$$

$$A = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

يُعطي متوسط طاقة الحركة بالمعادلة

$$< T >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}\right) dx$$

نجد أن

$$\frac{d}{dx}e^{-2\alpha x^2} = -2\alpha x e^{-2\alpha x^2}$$

و

$$\frac{d^2}{dx^2}e^{-\alpha x^2} = 4\alpha^2 x^2 e^{-\alpha x^2} - 2\alpha e^{-\alpha x^2}$$

وبالتالي يصبح متوسط طاقة الحركة

$$< T >= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(4A^2\alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2\alpha x^2} dx - 2\alpha A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\alpha x^2} dx\right)$$

وباستخدام التكاملين

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{b}}$$

و

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-bx^2} dx = \frac{1}{2b}\sqrt{\frac{\pi}{b}}$$

يصبح متوسط طاقة الحركة

$$< T >= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(4\alpha^2 A^2 (\frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}) - 2\alpha A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} A^2 \alpha \sqrt{\frac{\pi\alpha}{2}}$$

أو

$$<T>=\frac{\hbar^2\alpha}{2m}$$

ومتوسط طاقة الجهد V هو

$$<V>=\int_{-\infty}^{\infty}A^*e^{-\alpha x^2}\left(\frac{1}{2}kx^2\right)Ae^{-\alpha x^2}dx$$

أو

$$<V>=\frac{1}{2}kA^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-2\alpha\frac{1}{2}kA^2x^2}dx=\frac{1}{2}kA^2\frac{1}{4\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}$$

واخيرا نجد أن

$$<V>=\frac{k}{8\alpha}=\frac{m\omega^2}{8\alpha}$$

حيث $k=m\omega^2$.

ويكون متوسط الطاقة الكلية

$$<H>=<T>+<V>=\frac{\hbar^2\alpha}{2m}+\frac{m\omega^2}{8\alpha}$$

وبإجراء التفاضل بالنسبة للوسيط α نجد أن

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}<H>=\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{\hbar^2\alpha}{2m}+\frac{m\omega^2}{8\alpha}\right)=\frac{\hbar^2}{2m}-\frac{m\omega^2}{8\alpha^2}=0$$

ومنها نحصل علي

$$\alpha_0^2=\frac{2m^2\omega^2}{8\hbar^2}$$

أو

$$\alpha_0=\frac{m\omega}{2\hbar}$$

وبالتعويض في متوسط الطاقة نحصل علي

$$<H>_{min}=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

وهي طاقة الحالة الأرضية للمهتز.

مثال (6):

يمكننـا الآن تعميم هذه الطريقـة التغيريـة للحصـول علـى حد اعلـي لطاقـة الحالـة المثـارة الأولـي. ويـتم ذلك باستخدام دالـة موجـة محاولـة تكون متعامدة مـع دالـة المحاولة للحالة الأرضية $|\psi_0\rangle$.

الحل

فلنكتب دالة المحاولة للحالة المثارة الأولي على الصورة

$$|\psi> = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\psi_n>$$

حيث يمكن لأي دالة أن تكتب على الصورة العامة

$$|\psi> = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\psi_n> = c_0|\psi_0> \; + c_1|\psi_1> \; + c_2|\psi_2> \; + \cdots .$$

حيث c_n معاملات ثابتة. وبم أن الدالتين متعامدتان فإن

$$<\psi | \psi_0> = 0$$

أو

$$<\psi|\psi_0> = 0, \quad \text{and} \quad c_0 = 0$$

ويكون متوسط طاقة الجسم

$$<H> = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \, c_n^2$$

فلدالة المحاولة

$$\psi(x) = A \, x \, e^{-bx^2}$$

نجد أن معايرتها تُعطي بالمعادلة

$$1 = <\psi|\psi> = \left(\langle \sum_{m=0}^{\infty} c_m \langle\psi_m|\right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n|\psi_n\rangle\right) = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} c_m^* c_n <\psi_m|\psi_n>$$

ويكون

$$<\psi|\psi_0> = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{n=0}^{\infty} c_n \langle\psi_n|c_0\psi_0\rangle = 0.$$

التي تعني أن

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n^* c_0 <\psi_n|\psi_0> = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^* c_0 \delta_{n0} = c_0^* c_0 = |c_0|^2 = 0$$

وبالتالي نجد أن $c_0 = 0$. ويصبح الآن شرط معايرة الدالة علي الصورة

$$\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} c_m^* c_n <\psi_m|\psi_n> = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n <\psi_m|\psi_n> = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

ويكون متوسط طاقة الجسم

$$\begin{aligned}\langle H\rangle = <\psi|H|\psi> &= \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \langle\psi_m|\right) H \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n|\psi_n\rangle\right)\\ &= \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n E_n <\psi_m|\psi_n> = \sum_{m=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n E_n \delta_{mn}\\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \geq E_1 \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = E_1 .\end{aligned}$$

وتعني أن

$$\langle H\rangle \geq E_1$$

وللحصول على ثابت المعايرة A نكتب

$$<\psi|\psi> = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \left(Axe^{-bx^2}\right)^* \left(Axe^{-bx^2}\right) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2}\, dx = 2|A|^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2bx^2}\, dx$$

وباستخدام التكامل

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-px^2}\, dx = \frac{(2n-1)\cdots 5\cdot 3\cdot 1}{2(2p)^n}\sqrt{\frac{\pi}{p}} \quad \text{for} \quad p>0, \quad \text{and} \quad n = 0,1,2,3,\ldots.$$

نحصل على

$$2|A|^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2bx^2}\, dx = 2|A|^2 \frac{(2(1)-1)!!}{2(2\cdot 2b)^1}\sqrt{\frac{\pi}{2b}} = \frac{|A|^2}{4b}\sqrt{\frac{\pi}{2b}} = 1$$

أو

$$|A|^2 = 4b\sqrt{\frac{2b}{\pi}} = 4\sqrt{\frac{2b^3}{\pi}}$$

واخيرا نجد أن

$$A = 2\left(\frac{2b^3}{\pi}\right)^{1/4}$$

أولاً نحسب متوسط طاقة الحركة للجسم

$$\begin{aligned}\langle T\rangle = <\psi|T|\psi(x)> &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(Axe^{-bx^2}\right)^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\left(Axe^{-bx^2}\right)dx\\ &= -\frac{|A|^2\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(xe^{-bx^2}\right)^*\left(\frac{d^2}{dx^2}(xe^{-bx^2})\right)dx.\end{aligned}$$

حيث

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx^2}(xe^{-bx^2}) &= \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}(xe^{-bx^2})\right) = \frac{d}{dx}\left(e^{-bx^2} - 2bx^2e^{-bx^2}\right)\\ &= -2bxe^{-bx^2} - 4bxe^{-bx^2} + 4b^2x^3e^{-bx^2}\\ &= -6bxe^{-bx^2} + 4b^2x^3e^{-bx^2}.\end{aligned}$$

لنحصل علي

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= -\frac{|A|^2\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(xe^{-bx^2}\right)^*\left(-6bxe^{-bx^2} + 4b^2x^3e^{-bx^2}\right)dx\\ &= \frac{|A|^2\hbar^2}{2m}\left[6b\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-2bx^2}\,dx - 4b^2\int_{-\infty}^{\infty}x^4e^{-2bx^2}\,dx\right]\\ &= \frac{|A|^2\hbar^2}{m}\left[6b\int_0^{\infty}x^2e^{-2bx^2}\,dx - 4b^2\int_0^{\infty}x^4e^{-2bx^2}\,dx\right].\end{aligned}$$

وبالتعويض نحصل على

$$\langle T\rangle = \frac{|A|^2\hbar^2}{m}\left[6b\left(\frac{(2(1)-1)!!}{2(2\cdot 2b)^1}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right) - 4b^2\left(\frac{(2(2)-1)!!}{2\cdot(2\cdot 2b)^2}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right)\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\left(|A|^2\right)\left[6b\left(\frac{1}{8b}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right) - 4b^2\left(\frac{3\cdot 1}{32b^2}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right)\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{m}\left(4b\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\right)\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\left[\frac{3}{4} - \frac{3}{8}\right]$$

واخيرا نجد أن

$$\langle T\rangle = \frac{3\hbar^2 b}{2m}$$

وبالمثل نوجد متوسط طاقة الجهد V

$$\langle V\rangle = <\psi|V|\psi(x)> = \int_{-\infty}^{\infty}\left(Axe^{-bx^2}\right)^*\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\left(Axe^{-bx^2}\right)dx$$

$$= \frac{|A|^2 m\omega^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-2bx^2}\,dx$$

$$= |A|^2 m\omega^2\int_{0}^{\infty} x^4 e^{-2bx^2}\,dx$$

$$= |A|^2 m\omega^2\left(\frac{(2(2)-1)!!}{2\cdot(2\cdot 2b)^2}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right)$$

$$= m\omega^2\cdot 4b\sqrt{\frac{2b}{\pi}}\left(\frac{3\cdot 1}{32b^2}\sqrt{\frac{\pi}{2b}}\right) = m\omega^2\cdot\frac{12}{32b}$$

أي

$$\langle V\rangle = \frac{3m\omega^2}{8b}$$

ويصبح متوسط الطاقة الكلية

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = \frac{3\hbar^2 b}{2m} + \frac{3m\omega^2}{8b}.$$

وبإجراء التفاضل بالنسبة للوسيط نحصل علي

$$\frac{\partial}{\partial b}\left(\frac{3\hbar^2}{2m}b+\frac{3m\omega^2}{8}b^{-1}\right)=\frac{3\hbar^2}{2m}-\frac{3m\omega^2}{8}b^{-2}=0$$

لنحصل علي

$$b_0^2=\frac{3m\omega^2}{8}\frac{2m}{3\hbar^2}=\frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2}$$

أو

$$b_0=\frac{m\omega}{2\hbar}\,.$$

تصبح أقل طاقة للجسم

$$\begin{aligned}\langle H\rangle_{\min}&=\frac{3\hbar^2}{2m}b_0+\frac{3m\omega^2}{8b_0}\\&=\frac{3\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{2\hbar}+\frac{3m\omega^2}{8\,(m\omega/2\hbar)}=\frac{3}{4}\hbar\omega+\frac{3}{4}\hbar\omega\end{aligned}$$

واخيرا نجد أن

$$\langle H\rangle_{\min}=\frac{3}{2}\hbar\omega$$

وهي نفس طاقة الحالة المثارة الأولي التي أوجدناها سابقا، ويرجع ذلك لسبب أننا وُفقنا في اختيار دالة المحاولة للحالة المثارة الأولي بنجاح.

مثال (7):

مستخدما طريق التقريب لتقدير طاقة الحالة الأرضية لجسيم كتله m يتحرك في اتجاه المحور السيني إذا كان طاقة جهده $V=|b|x$ حيث b ثابت. باستخدام دالة المحاولة $\psi=Ae^{-\lambda|x|}$ حيث A و λ يمكن معرفتهما من طريقة التقريب.

الحل

أولا من معايرة الدالة نكتب

$$\mathcal{N}=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x=2A^2\int_0^{\infty}e^{-2\lambda x}\,\mathrm{d}x=\frac{A^2}{\lambda}$$

حيث $<\psi|\psi>=\mathrm{N}=1$. وتكون القيمة المتوقعة لمؤثر هاملتون هي

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \right|^2 + b\,|x|\,|\psi(x)|^2 \right\} \mathrm{d}x$$

$$= 2A^2 \int_0^{\infty} \left\{ \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} + b\,x \right\} e^{-2\lambda x}\,\mathrm{d}x$$

$$= A^2 \left\{ \frac{\hbar^2 \lambda}{2m} + \frac{b}{2\lambda^2} \right\} .$$

أو

$$E(\lambda) = \frac{\langle H \rangle}{\mathcal{N}} = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m} + \frac{b}{2\lambda} .$$

نوجد λ من المعادلة

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{\hbar^2 \lambda}{m} - \frac{b}{2\lambda^2} = 0$$

التي تُعطي

$$\lambda^3 = \frac{b}{2m\hbar^2}$$

وبالتعويض عن قيمة λ في معادلة الطاقة تصبح أقل طاقة

$$E(\lambda) = \frac{3\hbar^2 \lambda^2}{2m} = \frac{3\,\hbar^{2/3}\,b^{2/3}}{2^{5/3} m^{5/3}} \geq E_{\text{exact}}$$

مثال (8):

إذا كانت دالة الحالة الأرضية لمنظومة مؤثر هاملتون لها

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2mb^4} x^2$$

هي

$$\psi_0(x) = (\frac{1}{b\sqrt{\pi}})^{\frac{1}{2}} \frac{2x}{b} \exp(-\frac{x^2}{2b^2})$$

والتي تُعطي القيمة الحقيقية لطاقة الحالة الأرضية بالمقدار $E_0 = \sqrt{2.25}\,\frac{\hbar^2}{mb^2}$.
مستخدما دالة المحاولة التالية

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{(2\alpha)^{2n+1}}{(2n)!}}x^n \exp(-\alpha x)$$

حيث $n > 0$ و α ثابتان. أوجد أقل طاقة للحالة الأرضية للمنظومة أعلاه.

الحل

يُعطي متوسط الطاقة للمنظومة بالمعادلة

$$< E >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) H \psi(x) dx$$

أو

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\left(\frac{P^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2mb^4}x^2\right)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\frac{P^2}{2m}\psi(x)dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\frac{\hbar^2}{2mb^4}x^2\psi(x)dx$$

والذي يُعطي

$$< E >= \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m(2n-1)} + \frac{(2n+1)(n+1)\hbar^2}{4\alpha^2 mb^4}$$

ولإيجاد أقل طاقة نوجد أولا $\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0$ وكذلك $\frac{\partial E}{\partial n} = 0$. وتُعطي المعادلة $\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0$ $\alpha^4 = \frac{(4n^2-1)(n+1)}{2b^4}$ و وتُعطي المعادلة $\frac{\partial E}{\partial n} = 0$ $\alpha^4 = \frac{(4n+3)(2n-1)^2}{4b^4}$ وبالتعويض في معادلة متوسط الطاقة نحصل علي أقل طاقة للحالة الأرضية $E(n) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n+1)}{2(2n-1)}}\,\frac{\hbar^2}{mb^2}$.

مثال (9):

إذا كانت دالة المحاولة لمنظومة هي

$$\psi = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{3}{2b^3}}\,(b-|x|) & |x|<b \\ 0 & |x|>b \end{cases}$$

ومؤثر هاملتون للمنظومة هو $H=\dfrac{p^2}{2m}+A|x|$ حيث $A>0$ لكل قيم x .

الحل

يُعطي متوسط الطاقة للمنظومة بالمعادلة

$$<E>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)H\psi(x)dx$$

و الآن نجد أن

$$<E>=\int_{-b}^{b}\psi^*(x)\left(\frac{P^2}{2m}+A|x|\right)\psi(x)dx=\int_{-b}^{b}\psi^*(x)\frac{P^2}{2m}\psi(x)dx+\int_{-b}^{b}\psi^*(x)|x|\psi(x)dx$$

وبالتعويض عن ψ نحصل علي

$$<E>=\frac{3}{2b^3}\int_{-b}^{b}(b-|x|)(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2})(b-|x|)dx+\frac{3}{2b^3}\int_{-b}^{b}(b-|x|)A|x|(b-|x|)dx$$

وبم أن $\dfrac{d^2}{dx^2}|x|=2\delta(x)$ نحصل علي

$$E=\frac{3\hbar^2}{2mb^2}+\frac{Ab}{4}$$

ومن المعادلة $\dfrac{\partial E}{\partial b}=0$ نحصل علي $b^3=\dfrac{12\hbar^2}{Am}$ والتي تُعطي أقل طاقة

$<E>=0.86\left(\dfrac{A^2\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$. ماذا يحدث لأقل طاقة إذا استخدمنا دالتي المحاولة

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{\sqrt{b}}}\,\frac{x}{b}\exp(-\frac{x^2}{2b^2}) \qquad \text{و} \qquad \psi=\sqrt{\frac{1}{\sqrt{b}}}\,\exp(-\frac{x^2}{2b^2})$$

(الإجابة: $<E>=0.81\left(\dfrac{A^2\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$ و $<E>=1.86\left(\dfrac{A^2\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$).

مثال (10):

أوجد الحد الأعلى لطاقة جسيم موضوع في جهد علي النحو التالي

$$V(x) = \infty \text{ for x} \leq 0$$
$$V(x) = Bx \text{ for x} > 0$$

مستخدما دالة المحاولة

$$\psi(x;\alpha) = A\,x\;\exp(-\alpha x)$$

الحل

نوجد أولاً ثابت المعايرة A من المعادلة

$$\int_0^\infty \psi^* \psi\, dx = 1$$

وبالتعويض نجد أن

$$\int_0^\infty A^* A x^2 \exp(-2\alpha x) dx = 1$$

$$|A|^2 \int_0^\infty x^2 \exp(-2\alpha x) dx = |A|^2\, \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = 1$$

إذا نجد أن $|A|^2 = \sqrt{\frac{32\alpha}{\pi}}$. ونوجد الآن متوسط طاقة الحركة ثم الوضع علي النحو التالي

$$< E_k >= \int_0^\infty Ax\exp(-\alpha x)\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}Ax\exp(-\alpha x)dx$$

أو

$$< E_k >= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_0^\infty Axe^{-\alpha x}(\alpha^2 xe^{-\alpha x} - 2\alpha e^{-\alpha x})$$

أو

$$< E_k >= \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m}$$

ونجد كذلك أن متوسط طاقة الجهد

$$< V >= \int_0^\infty Axe^{-\alpha x} Bxe^{-\alpha x} dx$$

أو

$$< V >= |A|^2 \int_0^\infty Bx^3 e^{-\alpha x} e^{-\alpha x} dx = \frac{3B}{2\alpha}$$

ونجد أن

$$< H >=< E_k > + < V >= \frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} + \frac{3B}{2\alpha}$$

وبالتالي فإن

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} < H >= \frac{\partial}{\partial \alpha} (\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2m} + \frac{3B}{2\alpha}) = 0$$

تعني أن

$$\alpha = \sqrt[3]{\frac{3Bm}{2\hbar^2}}$$

ويكون الحد الأعلى للطاقة هو

$$H = \left(\frac{45 B^2 \hbar^2}{25m} \right)^{\frac{1}{3}}$$

تمرين:

(**1**) إذا كانت دالة المحاولة لمهتز توافقي تُعطي بـ

$$\psi(x) = c\ \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x+\frac{\theta eE}{m\omega^2}\right)^2\right]$$

علما بأن مؤثر هاملتون لهذا المهتز هو

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - eEx$$

مستخدما الطريقة التغيرية أوجد أقل طاقة لهذا المهتز.

(**2**) مستخدما دالة المحاولة التالية

$$\psi_0(x) = \left(\frac{1}{b\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{2x}{b}\exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

أوجد أقل طاقة للحالة الأرضية لمنظومة مؤثر هاملتون لها $H = \frac{P^2}{2m} + Ax$

(الإجابة: $E = 1.86\left(\frac{A^2\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$)

(3) مستخدما دالتي المحاولة

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{(2\alpha)^{2n+1}}{(2n)!}}x^n\exp(-\alpha x)$$

و

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{b\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right)$$

للمنظومة في المسالة السابقة أوجد أقل طاقة للحالة الأرضية مستخدما مرة الوسيط α ومرة أخرى الوسيط n .

(الإجابة: $E(n) = \left(\frac{27(2n+1)^2}{32(2n-1)}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\frac{\hbar^2 A^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$ ، $E(b) = 0.81\left(\frac{\hbar^2 A^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}$)

(4) مستخدما دالة المحاولة التالية

$$\psi(x)=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\exp(-\frac{m\omega\, x^2}{2\hbar})$$

أوجد أقل طاقة للحالة الأرضية لمنظومة مؤثر هاملتون لها $H=\frac{P^2}{2m}-V_\circ\delta(x)$

حيث $V_\circ>0$. (الإجابة : $E(\omega)=-0.318\frac{mV_\circ^2}{\hbar^2}$)

(5) مؤثر هاملتون لمنظومة يعطى من $H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$ حيث

$$V(x)=\begin{cases}\frac{m\omega\ x^2}{2}+\frac{\alpha}{x^2} & x\geq 0\\ \infty & \mathrm{x}<0\end{cases}$$

و α ثابت موجب أو سالب. أوجد أقل طاقة للحالة الأرضية مستخدما دالة المحاولة

$$\psi(x)=\left(\frac{m\omega'}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}}\frac{2x}{\pi^{1/4}}\exp(-\frac{m\omega' x^2}{2\hbar})$$

(الإجابة: $\omega'=\frac{\omega}{\sqrt{1+\frac{8m\alpha}{3\hbar^2}}}$ و $<E(\omega')>=\frac{3}{2}\hbar\omega\sqrt{1+\frac{8\alpha m}{3\hbar^2}}$).

(6) مؤثر هاملتون لمنظومة يعطى من $H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$ حيث

$$V(x)=\begin{cases}-\frac{\alpha\hbar c}{x} & x\geq 0\\ \infty & \mathrm{x}<0\end{cases}$$

و α ثابت موجب أو سالب. أوجد أقل طاقة للحالة الأرضية مستخدما دالة المحاولة

$$\psi(x)=\frac{2}{b}\left(\frac{1}{b\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}x\exp(-\frac{x^2}{2b^2})$$

علما بان القيمة الصحيحة لطاقة الحالة الأرضية هي $< E >= -\dfrac{mc^2\alpha^2}{2}$.
(الإجابة: $< E(\omega') >= -0.424 m c^2 \alpha^2$). استخدم دالتي المحاولة

$$\psi(x) = \frac{2}{b^2}\left(\frac{2}{3b\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} x^2 \exp(-\frac{x^2}{2b^2})$$

و

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{2}}{b^2} x^{\frac{3}{2}} \exp(-\frac{x^2}{2b^2})$$

وَضح أي الدوال أعلاه افضل لإيجاد أقل طاقة للمنظومة ثم تأكد من أن الدوال المستخدمة أعلاه عيارية.

(7) مؤثر هاملتون لمنظومة يعطى من $H = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \alpha \hbar (\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}\, x)^4$
و α ثابت. استخدم دالتي المحاولة التاليتين

$$\psi(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}\left(\frac{m\omega'}{\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \exp(-\frac{m\omega' x^2}{2\hbar})$$

و

$$\psi = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{3}{2b^3}}\,(b - |x|) & |x| < b \\ 0 & |x| > b \end{cases}$$

أوجد افضل دالة محاولة علما بان القيمة الصحيحة لطاقة الحالة الأرضية هي $< E >= 0.803771 \hbar\omega$.

(8) مؤثر هاملتون لمنظومة يعطى من $H = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{1}{2} m\omega^2 x^2$. استخدم دالتي المحاولة التالية $\psi = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{1}{b}} \cos(\dfrac{\pi x}{2b}) & |x| < b \\ 0 & |x| > b \end{cases}$. أوجد أقل طاقة للحالة الأرضية. (الإجابة: $< E >= 0.568 \hbar\omega$).

الفصل الخامس

الاضطراب المتغير مع الزمن

Time-dependent Perturbation

تمهيد

قد يحدث في بعض الأحيان أن يودي وجود اضطراب لمنظومة الي إحداث انتقالات لحالات أخرى ممكنة للمنظومة. ويعتمد هذا الانتقال علي طبيعة الاضطراب تحت الدراسة. ونحصل علي احتمالية انتقال المنظومة لاحدي حالاتها المختلفة.

5.1 المعالجة الشبه كلاسيكية (Semi-classical Treatment)

تصبح مسالة تغير دالة الموجة مع الزمن دون أن يتغير مؤثر هاملتون على الزمن مسالة إدخال طور فحسب، أي

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle\, e^{-iE_nt/\hbar} \tag{5.1}$$

حيث الحد $e^{-iEt/\hbar}$ هو الطور. فإذا كان هذا هو التغير الزمني الوحيد فإن الانتقال من حالة إلى أخرى لا يحدث. خذ مثلا ذرة الهيدروجين. فإذا كان الإلكترون في الحالة المثارة $|n,0,0\rangle = |2,0,0\rangle$ فإن التغير الزمني يُعطي بـ

$$|\psi_{2,0,0}(t)\rangle = |\psi_{2,0,0}(0)\rangle\, e^{-iE_2t/\hbar} \tag{5.2}$$

ولا يوجد سبب يجعل هذه الحالة أن تتحول (decay) إلى الحالة الأرضية. ويمكننا أن ننظر لهذه المسالة من ناحية هندسية حيث تُمثل هذه الحالة متجها،

وبمرور الوقت يتغير اتجاه الطور فحسب. وبالتـالي فـإن المعادلـة أعـلاه تصـف إلكترونا يظل باقيا في الحالة المثارة إلى الأبد. ولكننا نعلم أن الإلكترون سينتقل إلى الحالة الأرضية.

5.2 الاضطراب المعتمد علي الزمن

تُكتب معادلة شرودنجر المعتمدة مع الزمن علي الصورة

$$\mathcal{H}\,|\psi(t)> = i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi(t)> \qquad (5.3)$$

حيث H هو مؤثر هاملتون. والي هذه اللحظة نأخذ بأن H لا يعتمد علي الزمن. ويـؤدي هـذا إلـى حـالات مسـتقرة (stationary)، أو مـا يعـرف بميكانيكـا الكـم السـاكنة، حيـث لا تحـدث انتقـالات للإلكترونـات داخـل الـذرة، ويكـون التطـور الزمنـي للحالـة مسـالة تغيـرات فـي الطـور فحسـب. ولكـن إذا كـان يعتمـد مـؤثر هـاملتون علـى الـزمن صـراحة، أي $H = H(t)$ تلزمنـا طريقـة أخـرى لمعالجـة التطور الزمني. وعموما نعتبر أن الجزء من H الذي يعتمد على الزمن صـغيرا بالمقارنة مع الحد الذي لا يعتمد علـى الزمن. ونكتـب هذا التقسيم علـى الصـورة العامة

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t) \qquad (5.4)$$

حيث تكون تأثيرات الحد $H_1(t)$ اقل بكثير من تـأثيرات الحد H_0. وفـي الفيزيـاء الذريــة يمكننــا أن نفســر هـذا الوضــع بــان تــأثيرات المجــال الكهرومغناطيســي للفوتون تكون صغيرة بالمقارنة مع المجال الكهربي الساكن داخل الذرة.

وتعتمد الطريقة لمعالجة التطور الزمني بأننا نعلم بحل المعادلة التي تحتوي علي الحد المستغل عن الزمن

$$\mathcal{H}_0 | n> = E_n | n> \tag{5.5}$$

حيث رمزنا لـ$\langle\psi(x,t)|$ بالرمز المختصر $\langle n|$. أما الحل العام فهو حاصل الجمع لكل الحالات الساكنة علي الصورة

$$|\phi(t)> = \sum_n^{\infty} a_n | n> e^{-iE_n t/\hbar} \tag{5.6}$$

حيث $\langle n|$ هي مجموعة دوال تحقق الشرط

$$\langle n|m\rangle = \delta_{n,m} \tag{5.7}$$

حيث

$$.\ \delta_{n,m} = \begin{cases} 1 & n = m \\ 0 & n \neq m \end{cases} \tag{5.8}$$

ونكتـب دالـة الموجـة فـي الشـكل $\varphi(t)$ لتمييـز التغيـر الزمنـي البسـيط حيـث $H \neq H_1(t)$ من الدالة $\psi(t)$ التـي تحقق المعادلـة عندما يكون $H = H(t)$. وفـي هذه الحالة تصبح معادلة شرودنجر

$$(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1) |\psi(t)> = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)> \tag{5.9}$$

والتي يكون حلها على الصورة

$$|\psi(t)> = \sum_n^{\infty} a_n(t) | n> e^{-iE_n t/\hbar} \tag{5.10}$$

وبتعويض هذا الحل في المعادلة أعلاه نحصل على

$$(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1)\sum_n^{\infty} a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}=i\hbar\frac{d}{dt}\sum_n^{\infty} a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$\Rightarrow\ \mathcal{H}_0\sum_n^{\infty} a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}+\mathcal{H}_1\sum_n^{\infty} a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$=\sum_n^{\infty}\left[\left(i\hbar\frac{d}{dt}a_n(t)\right)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}+a_n(t)\big|n>\left(i\hbar\frac{d}{dt}e^{-iE_nt/\hbar}\right)\right]$$

$$\Rightarrow\ \sum_n^{\infty}\mathcal{H}_0\, a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}+\sum_n^{\infty}\mathcal{H}_1\, a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$=\sum_n^{\infty}\left[i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt}+a_n(t)i\hbar\left(\frac{-iE_n}{\hbar}\right)\right]\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$\Rightarrow\ \sum_n^{\infty}E_n\, a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}+\sum_n^{\infty}\mathcal{H}_1\, a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}=\sum_n^{\infty}\left[i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt}+a_n(t)E_n\right]\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$

أو

$$\Rightarrow\ \sum_n^{\infty}a_n(t)E_n\big|\not{n}> e^{-iE_nt/\hbar}+\sum_n^{\infty}\mathcal{H}_1\, a_n(t)\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$=\sum_n^{\infty}i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt}\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}+\sum_n^{\infty}a_n(t)E_n\big|\not{n}> e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$\Rightarrow\ \sum_n^{\infty}\mathcal{H}_1\big|n> a_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}=\sum_n^{\infty}i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt}\big|n> e^{-iE_nt/\hbar}. \tag{5.11}$$

وبضرب هذه المعادلة من الجهة اليسرى بـ $\langle m|$ نحصل علي

$$<m|\sum_n^{\infty}\mathcal{H}_1|n> a_n(t)e^{-iE_nt/\hbar} = <m|\sum_n^{\infty} i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt}|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$\sum_n^{\infty} <m|\,\mathcal{H}_1\,|n> a_n(t)e^{-iE_nt/\hbar} = \sum_n^{\infty} <m\,|i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt}|n> e^{-iE_nt/\hbar}$$
$$= \sum_n^{\infty} i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt} <m\,|\,n> e^{-iE_nt/\hbar}, \tag{5.12}$$

والتي تصبح بتعويض $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ في الصورة

$$\sum_n^{\infty} <m\,|\,\mathcal{H}_1\,|n> a_n(t)e^{-iE_nt/\hbar} = \sum_n^{\infty} i\hbar\frac{d\,a_n(t)}{dt}\delta_{m,n}e^{-iE_nt/\hbar}$$
$$= i\hbar\frac{d\,a_m(t)}{dt}e^{-iE_mt/\hbar}, \tag{5.13}$$

حيث نجد أن الجمع في الطرف الأيمن اصبح حدا واحدا وهو الذي تكون فيه $n = m$ (حيث تكون $\delta_{m,m} = 1$) وتكون بقية الحدود صفرا (إذا كان $n \neq m$).

وبترتيب حدود المعادلة أعلاه نحصل علي

$$i\hbar\frac{d\,a_m(t)}{dt} = \sum_n^{\infty} <m\,|\,\mathcal{H}_1\,|n> a_n(t)e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} \tag{5.14}$$

وبتعريف

$$\omega_{m,n} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}. \tag{5.15}$$

تصبح المعادلة الأخيرة في الصورة

$$i\hbar\frac{d\,a_m(t)}{dt} = \sum_n^{\infty} <m|\,\mathcal{H}_1\,|n> a_n(t)e^{i\omega_{mn}t}. \tag{5.16}$$

وهي المعادلة المطلوبة. وتُمثل مجموعة من المعادلات التفاضلية التي لا يسهل حلها علي وجه العموم، ولكن هنالك حالات خاصة للمعادلة أعلاه يمكن إيجاد

حلها بسهولة. وبكتابة الحدود القليلة الأولي من المعادلـة أعلاه وذلك بأخذ $n=1$ في الطرف الأيسر و $n=1,2,3$ نحصل علي

$$i\hbar\,\dot{a}_1(t) = <1\,|\,\mathcal{H}_1\,|1>\,a_1(t) + <1\,|\,\mathcal{H}_1\,|2>\,a_2(t)e^{i\omega_{12}t} + <1\,|\,\mathcal{H}_1\,|3>\,a_3(t)e^{i\omega_{13}t} + \cdots. \tag{5.17}$$

و

$$i\hbar\,\dot{a}_2(t) = <2\,|\,\mathcal{H}_1\,|1>\,a_1(t)e^{i\omega_{21}t} + <2\,|\,\mathcal{H}_1\,|2>\,a_2(t) + <2\,|\,\mathcal{H}_1\,|3>\,a_3(t)e^{i\omega_{23}t} + \cdots. \tag{5.18}$$

نلاحـظ أن مشـتقة $a_1(t)$ تعتمـد علـي $a_2(t)$ وتعتمـد مشـتقة $a_2(t)$ علـي $a_1(t)$ وهكذا ....

وعموما نجد أن الحدود القليلة الأولي في الجمع هي

$$i\hbar\,\dot{a}_m(t) = <m\,|\,\mathcal{H}_1\,|1>\,a_1(t)e^{i\omega_{m1}t} + <m\,|\,\mathcal{H}_1\,|2>\,a_2(t)e^{i\omega_{m2}t} + <m\,|\,\mathcal{H}_1\,|3>\,a_3(t)e^{i\omega_{m3}t} + \cdots \tag{5.19}$$

والجدير بالذكر أن عدد حدود المقدار $a_n(t)$ لا نهـائي. نلاحـظ أن المعادلـة أعـلاه تحتوي علي حدود يمكن كتابتها في الصورة

$$W_{ij} = <i\,|\,\mathcal{H}_1\,|j> \tag{5.20}$$

وبالتالي يمكن كتابة المعادلة السابقة في صورة مصفوفة على النحو التالي

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12}e^{i\omega_{12}t} & W_{13}e^{i\omega_{13}t} & \cdots \\ W_{21}e^{i\omega_{21}t} & W_{22} & W_{23}e^{i\omega_{23}t} & \cdots \\ W_{31}e^{i\omega_{31}t} & W_{32}e^{i\omega_{32}t} & W_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

5.2.1 منظومة متعددة المستويات

مثال (1):

نفترض أن لدينا منظومة تحتوي على حالتين هما المستوي الأرضي وحالة مثارة واحدة.

ومن أمثلة هذه المنظومات هي حالة الشعاع الجزئي والرنين المغناطيسي النووي الذي تم دراستهما من قبل العالمين رابي (Rabi) وبلخ وبيرسل (Bloch and Pucell).

وبم أن المنظومة تتكون من حالتين فإن المعادلة (5.17) تصبح في الصورة

$$\begin{aligned} i\hbar\,\dot{a}_1(t) &= <1\,|\,\mathcal{H}_1\,|1>\,a_1(t)\;+<1\,|\,\mathcal{H}_1\,|2>\,a_2(t)e^{i\omega_{12}t} \\ &= W_{11}a_1(t)+W_{12}a_2(t)e^{i\omega_{12}t} \end{aligned}$$

و

$$\begin{aligned} i\hbar\,\dot{a}_2(t) &= <2\,|\,\mathcal{H}_1\,|1>\,a_1(t)e^{i\omega_{21}t}+<2\,|\,\mathcal{H}_1\,|2>\,a_2(t) \\ &= W_{21}a_1(t)e^{i\omega_{21}t}+W_{22}a_2(t) \end{aligned}$$

باعتبار أن مصفوفة H_0 مصفوفة قطرية في قواعد ما، أي تكون قيمها الذاتية هي عناصر القطر في المصفوفة وتكون العناصر الأخرى صفرا. أما مصفوفة الاضطراب $H = H_0 + H_1$ تحتوي على عناصر قطرية و أخرى غير قطرية. وإذا طرحنا H_0 من H نحصل على مصفوفة H_1 التي تكون عناصر القطر فيها صفرا، أما العناصر الغير قطرية لا تساوي الصفر. ولكن ليس هذا ضروريا دائما حيث قد تحتوي مصفوفة الاضطراب عناصر لا تساوي الصفر. وتكون دراسة المنظومة سهلة إذا كانت العناصر القطرية لمصفوفة الاضطراب تساوي صفرا ويكون عموما هذا هو الحال. باعتبار أن العناصر القطرية لمصفوفة الاضطراب صفرا لهذه الحالة، ويعني ذلك أن

$$W_{11} = W_{22} = 0$$

حيث اخترنا فقط مؤثر هاملتون للاضطراب صفرا. تؤول معادلة المنظومة ذات المستوين إلى الشكل

$$i\hbar\, \dot{a}_1(t) = W_{12} a_2(t) e^{i\omega_{12} t}$$

و

$$i\hbar\, \dot{a}_2(t) = W_{21} a_1(t) e^{i\omega_{21} t}$$

ولهذه المنظومة لا توجد قيم أخرى لـ E_n وبالتالي تحتوي المنظومة على تردد واحد هو $\omega_{21} = -\omega_{12} = \omega_0$. وبالتالي تصبح المعادلتان السابقتان

$$\dot{a}_1(t) = -\frac{i}{\hbar} W_{12} a_2(t) e^{-i\omega_0 t}$$

و

$$\dot{a}_2(t) = -\frac{i}{\hbar} W_{21} a_1(t) e^{i\omega_0 t}$$

ويمكن حل هاتين المعادلتين كمتسلسلة في صورة تقريبات للصورة العامة لـ $a_n(t)$.

<u>مثال (2):</u>

بم أن $\omega_{21} = -\omega_{12}$ فإن

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = -\frac{E_1 - E_2}{\hbar} = -\omega_{12}$$

ونكتب دالة الموجة في الصورة

$$\left|\psi(t)\right> = a_1(t)\left|1\right> e^{-iE_1 t/\hbar} + a_2(t)\left|2\right> e^{-iE_2 t/\hbar}$$

حيث عوضنا عن $n = 1, 2$ في المعادلة أعلاه.

وبمعايرة الدالة، أي $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$ نحصل على

$$1 = <\psi(t)\,|\,\psi(t)>$$
$$= \left(a_1^*(t) <1\big|e^{iE_1t/\hbar} + a_2^*(t) <2\big|e^{iE_2t/\hbar}\right)\left(a_1(t)\big|1> e^{-iE_1t/\hbar} + a_2(t)\big|2> e^{-iE_2t/\hbar}\right)$$

أو

$$= a_1^*(t) <1\big|e^{iE_1t/\hbar}a_1(t)\big|1> e^{-iE_1t/\hbar} + a_1^*(t) <1\big|e^{iE_1t/\hbar}a_2(t)\big|2> e^{-iE_2t/\hbar}$$
$$+ a_2^*(t) <2\big|e^{iE_2t/\hbar}a_1(t)\big|1> e^{-iE_1t/\hbar} + a_2^*(t) <2\big|e^{iE_2t/\hbar}a_2(t)\big|2> e^{-iE_2t/\hbar}$$
$$= \big|a_1(t)\big|^2 <1\big|1> + a_1^*(t)a_2(t) <1\big|2> e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} + a_2^*(t)a_1(t) <2\big|1> e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} + \big|a_2(t)\big|^2 <2\big|2>$$

ومنها نجد أن

$$\big|\,a_1(t)\,\big|^2 + \big|\,a_2(t)\,\big|^2 = 1$$

حيـــث اســـتخدمنا الشـــرط $0 = \langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle$ و $1 = \langle 2|2\rangle = \langle 1|1\rangle$ (حيـــث $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$). باعتبار أن المنظومة كانت في الحالة الأرضية عند $t = 0$ أي أن $a_1(0) = 1$ و $a_2(0) = 0$. وفـــى هـــذه الحالـــة يكـــون التصـــحيح الصـــفري $a_1^{(0)}(t) = 1$ و $a_2^{(0)}(t) = 1$. وبتعويض هذه المقادير في المعادلة أعلاه نحصل علي

$$\frac{da_1(t)}{dt} = 0 \qquad \text{and} \qquad \frac{da_2(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}W_{21}(t)e^{i\omega_0 t}$$

وهما معادلتان تفاضليتان من الدرجة الأولي وبتكاملهما نحصل علي التقريب ذو الرتبة الأولي، أي

$$a_2^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t W_{21}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'$$

و

$$a_1^{(1)}(t) = \text{constant} = 1 - \big|\,a_2(t)\,\big|^2 \simeq 1$$

باعتبـار أن $a_2^{(1)}(t) << 1$. ويمكـن الحصـول علـي التصـحيح مـن الرتبـة الثانيـة بتكرار نفس الخطوات السابقة, حيث نحصل علي المعادلة

$$\frac{da_2(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}W_{21}(t)e^{i\omega_0 t} \quad \Rightarrow \quad a_2^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t W_{21}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'$$

ونلاحظ أن التصحيحين في هذه الحالة متطابقان. ويُعطي معامل الحالة الأرضية من المعادلة

$$\begin{aligned}\frac{da_1(t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}W_{12}(t)\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t W_{21}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'\right)e^{-i\omega_0 t}\\ &= -\frac{1}{\hbar^2}W_{12}(t)e^{-i\omega_0 t}\int_0^t W_{21}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'\end{aligned}$$

وبتكاملها نحصل على

$$\Rightarrow \quad a_1^{(2)}(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t W_{12}(t'')e^{-i\omega_0 t''}\left(\int_0^{t'} W_{21}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'\right)dt''$$

ونـهتم عموما بتصحيح الرتبة الأولـي والثانيـة فقط للمعـاملات المختلفـة لـ $a_n(t)$.

ويُعطي معامل الحالة المثارة الأولي من المعادلة

$$\begin{aligned}a_2^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t W_{21}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'\\ &= -\frac{i}{\hbar}W_{21}\int_0^t e^{i\omega_0 t'}\,dt'\end{aligned}$$

حيث $W_{21}(t') = W_{21}$ ثابتاً. ويكون معامل الرتبة الأولي للحالة المثارة الأولي لهذه المنظومة هو

$$\begin{aligned}a_2^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}W_{21}\frac{1}{i\omega_0}e^{i\omega_0 t'}\Big|_0^t\\ &= -\frac{W_{21}}{\hbar\omega_0}\left(e^{i\omega_0 t} - 1\right).\end{aligned}$$

ويمكننا الآن إيجاد احتمال قياس تصحيح الرتبة الأولى للحالة المثارة للمنظومة.

يُكتب الاحتمال $P_2(t)$ في الصورة

$$\begin{aligned}
P_2(t) &= \left| a_2^{(1)}(t) \right|^2 \\
&= \left| -\frac{W_{21}}{\hbar\omega_0} \left(e^{i\omega_0 t} - 1\right) \right|^2 \\
&= \frac{W_{21}^2}{\hbar^2\omega_0^2} \left(e^{-i\omega_0 t} - 1\right)\left(e^{i\omega_0 t} - 1\right) \\
&= \frac{W_{21}^2}{\hbar^2\omega_0^2} \left(1 - e^{i\omega_0 t} - e^{-i\omega_0 t} + 1\right) \\
&= \frac{W_{21}^2}{\hbar^2\omega_0^2} \left(2 - \cos\omega_0 t - i\sin\omega_0 t - \cos\omega_0 t + i\sin\omega_0 t\right) \\
&= \frac{2W_{21}^2}{\hbar^2\omega_0^2} \left(1 - \cos\omega_0 t\right) \\
&= \frac{2W_{21}^2}{\hbar^2\omega_0^2} 2\sin^2\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right)
\end{aligned}$$

واخيرا نجد أن

$$P_2(t) = \frac{4W_{21}^2}{\hbar^2\omega_0^2} \sin^2\left(\frac{\omega_0 t}{2}\right)$$

ويوضح الرسم أدناه سلوك هذا الاحتمال.

مثال (3):

أوجد معامل الرتبة الأولي للحالة المثارة للمنظومة التي تحتوى على مستويين بتطبيق اضطراب دوري يُعطي بالمعادلة

$$\mathcal{H}_1(t) = V_0(\vec{r})\cos\omega t$$

يُعطي معامل الرتبة الأولي بالمعادلة

$$a_2^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t W_{21}(t')e^{i\omega_0 t'}\,dt'$$

حيث

$$\begin{aligned} W_{21}(t) &= <2\big| \mathcal{H}_1(t) \big|1> \\ &= <2\big| V_0(\vec{r}) \cos\omega t \big|1> \\ &= <2\big| V_0(\vec{r}) \big|1> \cos\omega t \end{aligned}$$

ويصبح معامل الرتبة الأولي

$$\begin{aligned} a_2^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t <2\big| V_0(\vec{r}) \big|1> \cos\omega t' e^{i\omega_0 t'}\, dt' \\ &= -\frac{i}{\hbar} <2\big| V_0(\vec{r}) \big|1> \int_0^t \left(\frac{1}{2}e^{i\omega t'} + \frac{1}{2}e^{-i\omega t'}\right) e^{i\omega_0 t'}\, dt' \\ &= -\frac{i}{2\hbar} <2\big| V_0(\vec{r}) \big|1> \left(\int_0^t e^{i(\omega_0+\omega)t'}\, dt' + \int_0^t e^{i(\omega_0-\omega)t'}\, dt'\right) \\ &= -\frac{i}{2\hbar} <2\big| V_0(\vec{r}) \big|1> \left(\left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t'}}{i(\omega_0+\omega)}\right]_0^t + \left[\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t'}}{i(\omega_0-\omega)}\right]_0^t\right) \\ &= -\frac{1}{2\hbar} <2\big| V_0(\vec{r}) \big|1> \left(\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t'}-1}{(\omega_0+\omega)} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t'}-1}{(\omega_0-\omega)}\right). \end{aligned}$$

تُعرف الحالـة التـي يكون فيهـا $\omega \approx \omega_0$ بـالرنين وفـي هذه الحالـة يكـون معامـل الرتبة الأولي

$$a_2^{(1)}(t) \approx -\frac{1}{2\hbar} <2\big| V_0(\vec{r}) \big|1> \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t'}-1}{(\omega_0-\omega)}.$$

حيث نجد أن يغلب الحد الثاني على الأول في المعادلة السابقة.

ولحساب احتمال قياس تصحيح الرتبة الأولي للحالة المثارة نجد أن

$$\begin{aligned}
P_2(t) &= \left| a_2^{(1)}(t) \right|^2 \\
&\approx \left(-\frac{1}{2\hbar} <2|V_0(\vec{r})|1>^* \frac{e^{-i(\omega_0-\omega)t'}-1}{(\omega_0-\omega)} \right) \left(-\frac{1}{2\hbar} <2|V_0(\vec{r})|1> \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t'}-1}{(\omega_0-\omega)} \right) \\
&= \frac{1}{4\hbar^2} |<2|V_0(\vec{r})|1>|^2 \left(\frac{2(1-\cos(\omega_0-\omega)t)}{(\omega_0-\omega)^2} \right) \\
&= \frac{1}{2\hbar^2} |W_{21}|^2 \left(\frac{2\sin^2\left(\frac{(\omega_0-\omega)}{2}t\right)}{(\omega_0-\omega)^2} \right) \\
&= \frac{1}{\hbar^2} |W_{21}|^2 \left(\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_0-\omega)}{2}t\right)}{(\omega_0-\omega)^2} \right)
\end{aligned}$$

حيث نجد أن المساهمة الرئيسية للاحتمال تـأتى عندما يكون $\omega \approx \omega_0$. ويوضـح الشكل أدناه سلوك هذا الاحتمال لهذه المنظومة.

5.2.2 منظومة متعددة المستويات

في هذه الحالة نجد أن المعادلة

$$i\hbar \frac{d\,a_m(t)}{dt} = \sum_n^{\infty} <m|\mathcal{H}_1|n> a_n(t) e^{i\omega_{mn}t} \tag{5.21}$$

تكـون معادلــة كاملــة (exact). وتكــافي مجموعــة هــذه المعــادلات معادلــة شرودنجر. لقد وجدنا أن المنظومة ذات المستويين الاثنين مناسبة للتطبيق وذلك لأنها تحتوي فقط علـى حدين. و الآن نحن بصـدد منظومـة لهـا عدة دوال ذاتيـة يمكن للمنظومة أن تكون في أحدها. ونكتب مؤثر هاملتون على الصورة

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \lambda \mathcal{H}_1(t) \tag{5.22}$$

حيث λ وسيط يمكن تغيره للحصول علـى مقدار الاضـطراب المطلـوب. فـإذا كانت $\lambda = 1$ نحصل علي مؤثر هـاملتون المعتـاد $H = H_0 + H_1(t)$. وفـى الواقـع لا تظهر λ في المعادلة التي نرغب فيها وبالتالي يمكن أن تكون أي ثابت ولكن

فـي الطريقـة المسـتخدمة نعتبـر دائمـا أن $\lambda \leq 1$. وبتعـويض المعادلـة أعـلاه فـي المعادلة (**5.21**) تصير المعادلة

$$i\hbar \frac{d\,a_m(t)}{dt} = \sum_j^{\infty} <m\,|\,\lambda\,\mathcal{H}_1\,|\,j>\,a_j(t)e^{i\omega_{mj}t}$$
$$= \sum_j^{\infty} <m\,|\,\mathcal{H}_1\,|\,j>\,\lambda\,a_j(t)e^{i\omega_{mj}t} \qquad (5.23)$$

ونقوم بفك المعامل $a_n(t)$ كمتسلسلة قوة في الوسيط λ وذلك على الصورة

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \lambda\,a_n^{(1)}(t) + \lambda^2\,a_n^{(2)}(t) + \lambda^3\,a_n^{(3)}(t) + \cdots \qquad (5.24)$$

حيث يمثـل الـرقم فـوق الحـرف (superscript) رتبـة التصـحيح. والآن تصـبح المعادلة أعلاه بعد التعويض

$$i\hbar \frac{d}{dt}\left(a_m^{(0)}(t)+\lambda a_m^{(1)}(t)+\lambda^2 a_m^{(2)}(t)+\cdots\right) = \sum_j^{\infty} <m|\mathcal{H}_1|j>\,\lambda\left(a_j^{(0)}(t)+\lambda a_j^{(1)}(t)+\lambda^2 a_j^{(2)}(t)+\cdots\right)e^{i\omega_{mj}t}$$
$$= \sum_j^{\infty} <m|\mathcal{H}_1|j>\,\left(\lambda a_j^{(0)}(t) + \lambda^2 a_j^{(1)}(t) + \lambda^3 a_j^{(2)}(t) + \cdots\right)e^{i\omega_{mj}t}. \qquad (5.25)$$

ونجـد أن سـر اسـتخدام الوسـيط λ هـو أن المعادلـة الأخيـرة تكـون صـالحة (صحيحة) حدا بعد حد لقوي متساوية لـ λ، أي

$$i\hbar \frac{d}{dt}\lambda^k a_m^{(k)}(t) = \sum_j^{\infty} <m|\mathcal{H}_1|j>\,\lambda^k a_j^{(k-1)}(t)e^{i\omega_{mj}t}$$
$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} a_m^{(k)}(t) = \sum_j^{\infty} <m|\mathcal{H}_1|j>\,a_j^{(k-1)}(t)e^{i\omega_{mj}t}, \qquad (5.26)$$

حيث نجد أن الحد λ^k يتلاشي من طرفي المعادلة. والاهم من ذلك هو أن

$$i\hbar\frac{d}{dt}a_m^{(1)}(t)=\sum_j^{\infty}<m|\mathcal{H}_1|j>a_j^{(0)}(t)e^{i\omega_{mj}t},$$

$$\Rightarrow\quad a_m^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\sum_j^{\infty}<m|\mathcal{H}_1|j>a_j^{(0)}(t')e^{i\omega_{mj}t'}dt'. \tag{5.27}$$

والذي يشبه معادلة المنظومة ذات المستويين الاثنين باعتبـار أن المنظومـة بـدأت فـي الحالـة الذاتيـة n و $a_{j\neq n}^{(0)}(0)=0$ وللمنظومـة التـي تبـدأ مـن $a_{j=n}^{(0)}(0)=1$ مـثلاً وذلك بفرض أن المنظومة معايرة. وبعبارة أخرى يمكننا كتابة

$$a_j^{(0)}(0)=\delta_{j,n} \tag{5.28}$$

للمنظومة في الحالـة الذاتيـة رقـم j عنـد اللحظـة $t=0$. ويكـون التكامـل فـي هـذه الحالة حدا واحدا، وبالتالي تصبح المعادلة **(5.27)**

$$a_m^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t<m|\mathcal{H}_1|n>e^{i\omega_{mn}t'}dt' \tag{5.29}$$

حيث استبعدنا المعامل لان $a_n^{(0)}(t')\approx 1$ إذا كان الاضـطراب صـغيراً. وباسـتخدام التعبير

$$W_{mn}=<m\,|\,\mathcal{H}_1\,|\,n> \tag{5.30}$$

تصبح المعادلة الأخيرة في الصورة

$$a_m^{(1)}(t)=-\frac{i}{\hbar}\int_0^t W_{mn}(t')e^{i\omega_{mn}t'}dt' \tag{5.31}$$

وهـي النتيجـة التـي نبحـث عنهـا. وتُمثـل هـذه المعادلـة تصـحيح الرتبـة الأولـي للمعامل رقم m (a_m). وإذا كانت التصحيحات من الدرجات العليا صغيرة فإن

$$a_m(t)\approx a_m^{(0)}(t)+a_m^{(1)}(t)=a_m^{(1)}(t). \tag{5.32}$$

و غالبا وبسبب هذا لا نكتب رمز رتبة التصحيح فوق الحرف.

نجد أن الكمية $\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2$ تُمثل احتمال وجود المنظومة في الحالة رقم m عند اللحظة t .فإذا بدأت المنظومة في الحالة رقم j فإن المقدار $\left|a_m^{(1)}(t)\right|^2$ يُعطي احتمال حدوث الانتقال من الحالة رقم n إلى الحالة رقم m خلال الفترة t .

مثال (1):

إذا كانت منظومة متعددة المستويات في أحد حالاتها الذاتية. أوجد احتمال قياس الحالة المثارة رقم m في اللحظة t إذا اضطربت المنظومة بتأثير اضطراب صغيرا وثابتا لفترة زمنية t. يُعطي معامل الحالة رقم m بالمعادلة

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{W_{mn}}{\hbar\omega_{mn}}\left(e^{i\omega_{mn}t} - 1\right)$$

نرمز للحالة الأصلية بالرمز n (كما فعلنا سابقاً)، حيث $W_{mn} = \langle m|V_0\,|\,n\rangle$ و $\hbar\,\omega_{mn} = E_m - E_n$. يُعطي الاحتمال المطلوب بمربع هذا المقدار، أي

$$P_m(t) = \left|\,a_m^{(1)}(t)\,\right|^2 = \frac{4W_{mn}^2}{\hbar^2\omega_{mn}^2}\sin^2\left(\frac{\omega_{mn}t}{2}\right)$$

كما فعلنا سابقاً. ونقوم الآن بحساب احتمال الانتقال إلى الحالة m لمنظومة ذات مستويات عديدة عند وجود اضطراب دوري (periodic) بعد اقتراب المنظومة من لحظة الرنين. للاضطراب الدوري يأخذ الصورة $H_1(t) = V_0\cos\omega t$.

ويُعطي معامل الحالة m بالمعادلة

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{1}{2\hbar} < m\,|\,V_0(\vec{r})\,|\,n > \left(\frac{e^{i(\omega_{mn}+\omega)t'} - 1}{(\omega_{mn}+\omega)} + \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t'} - 1}{(\omega_{mn}-\omega)}\right)$$

وبالاقتراب من لحظة الرنين $(\omega_{12} = \omega_0)$ نجد أن

$$a_m^{(1)}(t) \approx -\frac{1}{2\hbar} < m \,|\, V_0(\vec{r}) \,|\, n > \frac{e^{i(\omega_{mn}-\omega)t'} - 1}{(\omega_{mn} - \omega)}$$

يُعطي الاحتمال، $P_m(t)$ ، بالمعادلة

$$P_m(t) = \left| a_m^{(1)}(t) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| W_{mn} \right|^2 \left(\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{mn}-\omega)}{2} t\right)}{(\omega_{mn} - \omega)^2} \right)$$

حيث استخدمنا العلاقة

$$e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} = \cos(\omega_{mn} - \omega)t + i \sin(\omega_{mn} - \omega)t$$

وأن

$$W_{mn} = < m|V_0(r)|n >$$

مثال (2):

سُلط مجال كهربي متغير $E = (E_0 \cos \omega t)\hat{k}$ على منظومة ذات مستويات متعددة. فما هو احتمال انتقال المنظومة من الحالة الذاتية n إلى الحالة الذاتية m بدلالة الزمن t ؟

أولاً يُعطي الاضطراب بالمعادلة $H_1 = -q\phi(r)$ وذلك لان

$$E = -\frac{d\,\Phi(\vec{r})}{dr} = -\frac{d\,\Phi(\vec{r})}{dz}$$

إذا كان المجال في اتجاه $\hat{k}$. وبالتالي نجد أن

$$d\,\Phi(\vec{r}) = -E\,dz = E_0\cos(\omega t)\,dz$$

$$\Rightarrow \quad \Phi(\vec{r}) = -\int E_0\cos(\omega t)\,dz = -E_0\cos(\omega t)\int dz = -E_0\,z\,\cos(\omega t)$$

والآن نكتب الحد H_1 علي الصورة

$$\mathcal{H}_1(t) = E_0\,q\,z\,\cos(\omega t)$$

وإذا عوضنا عن المقدار $V_0 = qE_0z$ في معادلة الاحتمالية أعلاه نحصل على

$$P_m(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\,<m\,|\,E_0qz\,|\,n>\,\right|^2\left(\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{mn}-\omega)}{2}t\right)}{(\omega_{mn}-\omega)^2}\right)$$

$$= \frac{E_0^2q^2}{\hbar^2}\left|\,<m\,|\,z\,|\,n>\,\right|^2\left(\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{mn}-\omega)}{2}t\right)}{(\omega_{mn}-\omega)^2}\right).$$

5.3 معدلات الانتقال (Transition Rates)

يُعّرف معدل الانتقال (R) عموما بأنه معدل التغير في الاحتمال (P)، أي

$$R \equiv \frac{dP(t)}{dt} \tag{5.33}$$

ولكن يجب اخذ اعتبارات إضافية للمنظومات متعددة الطاقة. فلو نظرنا إلى الشكل (..) نجد انه متمركز كليا ولكنه يختلف عن شكل دالة الدلتا ($Delta \quad function$). فإذا اعتبرنا أن معظم الحالات متقاربة جدا من بعضها البعض فإن الاحتمال يتحول من الجمع إلى التكامل

$$P(t) = \sum\left|\,a_m(t)\,\right|^2 \;\rightarrow\; \int_{-\infty}^{\infty}\left|\,a_m(t)\,\right|^2\rho(\omega)\,d\omega \tag{5.34}$$

حيث $\rho(\omega)$ تُمثل كثافة الحالات، أي عدد الحالات علي وحدة فترة التردد ω.

وعليه يصبح معدل الانتقال

$$R_{n\to m} = \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} \left| a_m(t) \right|^2 \rho(\omega)\, d\omega \tag{5.35}$$

أو

$$R_{n\to m} dt = d\left(\int_{-\infty}^{\infty} \left| a_m(t) \right|^2 \rho(\omega)\, d\omega\right)$$

$$\Rightarrow \quad R_{n\to m} = \frac{1}{t}\int_{-\infty}^{\infty} \left| a_m(t) \right|^2 \rho(\omega)\, d\omega. \tag{5.36}$$

وباعتبار أن $\rho(\omega)$ تتغير ببطء مع تغير التردد في المدى ذو الاهتمام المعني، والآن نجد أن

$$R_{i\to f} = \frac{\rho(\omega_{if})}{t}\int_{-\infty}^{\infty} \left| a_f(t) \right|^2 d\omega \tag{5.37}$$

حيث i و f يرمزان للحالة الابتدائية والنهائية على التتالي للمنظومة.

مثال (1):

ما هو معدل الانتقال لمنظومة متعددة المستويات سُلط عليها مجال كهربي $E = E_0 \cos(\omega t)\hat{k}$ ؟

باستخدام المعادلة السابقة نجد أن

$$R_{i\to f} = \frac{\rho(\omega_{if})}{t}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{E_0^2 q^2}{\hbar^2} \left| <f\,|\,z\,|\,i> \right|^2 \left(\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{fi}-\omega)}{2}t\right)}{(\omega_{fi}-\omega)^2}\right) d\omega$$

$$= \frac{E_0^2 q^2}{\hbar^2} \left| <f\,|\,z\,|\,i> \right|^2 \frac{\rho(\omega_{if})}{t}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\sin^2\left(\frac{(\omega_{fi}-\omega)}{2}t\right)}{(\omega_{fi}-\omega)^2}\right) d\omega.$$

وبوضع

$$\frac{(\omega-\omega_{fi})}{2}t=x \quad \Rightarrow \quad \omega_{fi}-\omega=-\frac{2}{t}x$$

ثم بتفاضل الطرفين نحصل علي

$$\Rightarrow \quad d\omega=\frac{2}{t}dx \qquad \text{and} \qquad (\omega_{fi}-\omega)^2=\frac{4}{t^2}x^2$$

وتعني الإشارة السالبة في التفاضل نقصان الطاقة والموجبة زيادة الطاقة فقط، وبالتالي نحصل على

$$R_{i\to f}=\frac{E_0^2q^2}{\hbar^2}\left|<f\,|\,z\,|\,i>\right|^2\frac{\rho(\omega_{if})}{t}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2(x)}{4x^2}t^2\,\frac{2}{t}dx$$

$$=\frac{E_0^2q^2}{2\hbar^2}\left|<f\,|\,z\,|\,i>\right|^2\rho(\omega_{if})\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2(x)}{x^2}\,dx$$

وبم أن

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2(x)}{x^2}\,dx=\pi$$

فإن

$$R_{i\to f}=\frac{E_0^2q^2\pi}{2\hbar^2}\left|<f\,|\,z\,|\,i>\right|^2\rho(\omega_{if})$$

مسائل متنوعة

(1) إذا كانت منظومة تتكون من حالتين توصف بالمعادلتين أدناه

$$\frac{dc_a(t)}{dt}=(i\hbar)^{-1}<a\,|\,H_1\,|\,b>\ e^{-i\omega_0 t}\,c_b(t)$$

$$\frac{dc_b(t)}{dt}=(i\hbar)^{-1}<b\,|\,H_1\,|\,a>\ e^{+i\omega_0 t}\,c_a(t).$$

أوجد احتمال وجود المنظومة في الحالتين a و b. بإجراء التفاضل مرة بالنسبة للزمن للمعادلة الثانية وباستخدام المعادلة الأولي، نحصل على

$$\frac{d^2c_b(t)}{dt^2} = (i\omega_0)\,\frac{dc_b(t)}{dt}\ - \frac{1}{\hbar^2}\,|<a\mid H_1\mid b>|^2\,c_b(t)$$

وبوضع

$$\alpha^2\ = |<a\mid H_1\mid b>|^2/\hbar^2$$

في المعادلة أعلاه نحصل على

$$\frac{d^2c_b(t)}{dt^2}\ -\ (i\omega_0)\,\frac{dc_b(t)}{dt}\ +\ \alpha^2\,c_b(t) = 0$$

وهي معادلة تفاضلية اعتيادية من الرتبة الثانية ويأخذ حلها الصورة

$$c_b(t)\ =\ g(t)\ =\ A\ \exp(\,i\,(\omega_0+\omega)t/2)\ +\ B\ \exp(\,i\,(\omega_0-\omega)t/2)$$

والذي يمكن كتابته في الصورة

$$c_b(t) = [\,C\ \cos(\frac{\omega t}{2})\ +\ D\ \sin(\frac{\omega t}{2})\,]\ \exp(\frac{i\omega_0 t}{2})$$

وباستخدام الشروط الحدية الابتدائية، أي $c_b(0)=0$، في المعادلة أعلاه نجد أن $C=0$. وبالتالي تصبح المعادلة أعلاه

$$c_b(t)\ =\ D\ \sin(\frac{\omega t}{2})\ \exp(\frac{i\omega_0 t}{2})$$

ويلزمنا معرفة $c_a(t)$ والثابت D. وبتعويض $c_b(t)$ في المعادلة الأولي نجد أن

$$\frac{dc_b(t)}{dt}\ =\ (i\hbar)^{-1}\ <b\mid H_1\mid a>\ \exp(i\omega_0 t)\ c_a(t)$$

وهي معادلة تفاضلها من الرتبة الأولى وحلها هو

$$c_a(t) = \frac{i\hbar}{<b\,|\,H_1\,|\,a>}\,\frac{\omega}{2}\ \exp(\frac{-i\omega_0 t}{2})\ D\ \left[\cos(\frac{\omega t}{2})\ +\ i\ \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)\ \sin(\frac{\omega t}{2})\right]$$

وبتطبيق الشروط الحدية، أي $c_a(0)=1$ ، نجد أن

$$D = 2 < b \mid H_1 \mid a > / i\hbar\omega$$

وبتعويضه في المعادلة أعلاه نجد أن

$$c_a(t) = \exp\left(\frac{-i\omega_0 t}{2}\right) \left[\cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) + i \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right) \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)\right]$$

والان يمكن أن نتحقق من أن

$$\mid c_a \mid^2 + \mid c_b \mid^2 = 1$$

باستعمال المعادلتين أعلاه.

(2) سُلط اضطراب متغير مع الزمن علي الصورة

$$H_1(t') = \begin{pmatrix} 0 & H'_{ab} \\ H'_{ba} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{for} \quad 0 \le t' \le t,$$

$$H_1(t') = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{for} \quad t' < 0 \ \text{ or } \ t' > t.$$

على منظومة مكونة من حالتين. أوجد تصحيح معامل الرتبة الأولي والثانية ثم بّين انهما متساويان. يُعطي تصحيح معامل الرتبة الأولي بالمعادلة

$$\frac{dc_b}{dt} = \frac{1}{i\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t}$$
$$\Rightarrow \quad dc_b = \frac{1}{i\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} dt$$

وبتكاملها نحصل علي

$$c_b^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H'_{ba} e^{i\omega_0 t'} dt'$$

إذا كان $H'_{ba}(t)$ ثابتا أو يتغير ببطء فإن

$$c_b^{(1)} = \frac{H'_{ba}}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_0 t'}dt'$$
$$= \frac{H'_{ba}}{i\hbar}\frac{1}{i\omega_0}e^{i\omega_0 t'}\Big|_0^t$$

أو

$$c_b^{(1)} = -\frac{H'_{ba}}{\hbar\omega_0}\left(e^{i\omega_0 t} - 1\right)$$

ويُعطي تصحيح معامل الرتبة الثانية بالمعادلة

$$\frac{dc_a^{(2)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}\left(c_b^{(1)}\right)$$

والتي يمكن كتابتها في الصورة

وباعتبار أن $c_a^{(0)}(t) = 1$ و $c_a^{(1)}(t) = 0$ فإن

$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t H'_{ab}e^{-i\omega_0 t'}\left[H'_{ba}\int_0^{t'} e^{i\omega_0 t''}dt''\right]dt'$$
$$= 1 - \frac{\left|H'_{ab}\right|^2}{\hbar^2}\int_0^t e^{-i\omega_0 t'}\left[\int_0^{t'} e^{i\omega_0 t''}dt''\right]dt'$$
$$= 1 - \frac{\left|H'_{ab}\right|^2}{\hbar^2}\int_0^t e^{-i\omega_0 t'}\left[\frac{1}{i\omega_0}e^{i\omega_0 t''}\right]_0^{t'}dt'$$
$$= 1 - \frac{\left|H'_{ab}\right|^2}{i\omega_0\hbar^2}\int_0^t e^{-i\omega_0 t'}\left[e^{i\omega_0 t'} - 1\right]dt'$$
$$= 1 - \frac{\left|H'_{ab}\right|^2}{i\hbar^2\omega_0}\int_0^t \left[1 - e^{-i\omega_0 t'}\right]dt'$$
$$= 1 - \frac{\left|H'_{ab}\right|^2}{i\hbar^2\omega_0}\left[t' - \frac{1}{-i\omega_0}e^{-i\omega_0 t'}\right]_0^t$$

أو

$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{\left|H'_{ab}\right|^2}{i\hbar^2\omega_0}\left[t' + \frac{1}{i\omega_0}e^{-i\omega_0 t'}\right]_0^t$$

واخيرا نحصل على

$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{\left|H'_{ab}\right|^2}{i\hbar^2\omega_0}\left[t + \frac{1}{i\omega_0}e^{-i\omega_0 t} - \frac{1}{i\omega_0}\right]$$

وتُعطي $c_b^{(2)}$ بالمعادلة التالية

$$\frac{dc_b^{(2)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0 t}\left(c_a^{(1)}\right) = \frac{1}{i\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0 t}\,(1) = \frac{1}{i\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0 t}$$

وبتكاملها نحصل علي

$$c_b^{(2)}(t) = -\frac{H'_{ba}}{\hbar\omega_0}\left(e^{i\omega_0 t} - 1\right)$$

وبالمقارنة مع المعادلة السابقة نجد أن

$$c_b^{(1)}(t) \;=\; c_b^{(2)}(t)$$

ويأتي هذا نتيجة للشروط الابتدائية $c_a^{(1)} = 1$ الذي يتبع من أن $c_a^{(0)} = 1$ والذي يتبع من أن $c_a(0) = 1$ وتوضح هذه الشروط أن المنظومة تكون في إحدى الحالتين وان وجودها في الأولي يعني عدم وجودها في الثانية كليا. وتصبح الدالة الموجية للمنظومة في البدء في الصورة

$$\Psi(0) = c_a\psi_a + c_b\psi_b$$

(3) يتحرك جسيم كتلته حرا داخل جهد مربع. إذا اسقط حاجر جهد ارتفاعه V_0، أوجد احتمال انتقال هذا الجسم من الحالة الأرضية إلى الحالة المثارة الأولي؟

يُعطي احتمال انتقال الجسم من الحالة الابتدائية i إلى النهائية f بالمعادلة

$$P(i \to f) = 4 \; | < f \,|\, H_1 \,|\, i > |^2 \; \frac{\sin^2 \left((E_f - E_i) \; t/2\hbar \right)}{(E_f - E_i)^2}$$

تعنــي الحالــة الأرضــية أن $|i\rangle = |1\rangle$ والنهائيــة هــي الحالــة المثــارة الأولــي، أي $|f\rangle = |2\rangle$. تُعطــي طاقــة الحالــة الأرضــية والمثــارة الأولــي بــ E_1 و E_2 علــي التتالي.

عند الاضطراب يُعطي الجهد بـ

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{if } 0 \le x \le a/2; \\ 0, & \text{if } a/2 \le x \le a. \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

ومؤثر الاضطراب الكلي للجسم هو

$$H = H_0 + H_1$$

حيث $H_1 = V_0$ (مع العلم أن $V_0 << E_1$).

والآن نجد

$$E_f - E_i = \bar{E}_2 - \bar{E}_1$$

تُعطي طاقة الجسم قبل الاضطراب بالمعادلة

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

والدالة الموجية بالمعادلة

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

حيث $n = 1, 2, 3, \cdots$. والآن يكون

$$E_2 - E_1 = \frac{3\,\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,a^2}$$

وكذلك

$$\begin{aligned} <2\left| H_1 \right|1> &= \int_0^a \psi_2^* V_0 \psi_1 \, dx \\ &= \int_0^{a/2} \psi_2^* V_0 \psi_1 \, dx + \int_{a/2}^a \psi_2^* (0) \psi_1 \, dx \end{aligned}$$

وبالتعويض نحصل علي

$$< 2 \mid H_1 \mid 1 > = \int_0^{a/2} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \; V_0 \; \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \, dx$$

حيث يساوي الحد الثاني من المعادلة أعلاه صفرا وذلك لأن $V = 0$ في المدى $\frac{a}{2} \le x \le a$.

ونحصل علي

$$\begin{aligned} <2\left| H_1 \right|1> &= \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) V_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{2V_0}{a} \left[\frac{\sin\left[(2\pi/a - \pi/a)\, x\right]}{2\,(2\pi/a - \pi/a)} - \frac{\sin\left[(2\pi/a + \pi/a)\, x\right]}{2\,(2\pi/a + \pi/a)} \right]_0^{a/2} \\ &= \frac{V_0}{a} \left[\frac{\sin\left[(\pi/a)\, x\right]}{(\pi/a)} - \frac{\sin\left[(3\pi/a)\, x\right]}{(3\pi/a)} \right]_0^{a/2} \\ &= \frac{V_0}{3\pi} \Big[3 \sin\left[(\pi/a)\, x\right] - \sin\left[(3\pi/a)\, x\right] \Big]_0^{a/2} \\ &= \frac{V_0}{3\pi} \left[3 \sin(\pi/2) - 0 - \sin(3\pi/2) + 0 \right] \\ &= \frac{V_0}{3\pi} \left[3\,(1) - (-1) \right] \end{aligned}$$

أو

$$<2\left| H_1 \right|1> = \frac{4V_0}{3\pi}$$

والآن يصبح احتمال انتقال الجسم من الحالة الأرضية إلى الحالة المثارة الأولى

$$P(\,1\;\rightarrow\;2\,)\;=\;\left[\frac{16\,m\,a^2\,V_0}{9\,\pi^3\,\hbar^2}\sin\left(\frac{3\,\pi^2\,\hbar\,T}{4\,m\,a^2}\right)\right]^2$$

المراجع

[1] Sakurai, J., *Modern Quantum Mechanics*, McGraw Hills, 1985.

[2] Messiah, A: Quantum Mechanics, McGraw Hills, 1961.

[3] Dirac, P. A. M., *The principles of quantum mechanics*, 4th ed., Clarendon Press, Oxford, 1981.

[4] John Von Neumann: *Mathematical foundations of quantum mechanics*, 1955.

[5] Schiff, Leonard, L: *Quantum Mechanics*, 3rd ed., 1968.

[6] Gasiorowicz, S., *Quantum Physics*, John Wiley and Sons, NewYork, 1974.

[7] Merzbacher, Eugen, *Quantum Mechanics*, 3rd Ed., Wiley, 1998.

[8] Eisberg, Robert and Resnick, Robert, *Quantum Physics*, 2nd Ed., Wiley, 1985.

[9] Abramowitz, M. and Stegun, I. A., *Handbook of Mathematical Functions with Formulas,* Graphs, and Mathematical Tables, 10th ed., U.S. Govt. Print. Off., Washington, 1972.

[10] Kogan, V. I., *Problems in Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood, 1963.

[11] Landau, L. D. and Lifshitz, E.M., *Quantum mechanics: non-relativistic theory*, 3d ed., Pergamon Press, New York, 1991

[12] Shankar, R., *Principles of quantum mechanics*, Plenum Press, New York, 1980 .

[13]. Sakurai, J. J, *Modern quantum mechanics*, Rev. ed., Addison-Wesley Pub. Co., Reading,1994.

[14] Griffiths, D. J., *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1995.